

**Zur Theorie der chromatographischen Abtrennung des  
überschüssigen Enantiomers aus Mischungen mit ungleichen  
Enantiomerenanteilen**

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften  
(Dr. rer. nat.)

dem Fachbereich Pharmazie und Lebensmittelchemie  
der Philipps-Universität Marburg  
vorgelegt

von  
**Peter Krüger**  
aus Dortmund

Marburg 1997

Vom Fachbereich Pharmazie und Lebensmittelchemie  
der Philipps-Universität Marburg / Lahn

als Dissertation angenommen am:

05.02.1997

Tag der mündlichen Prüfung:

05.02.1997

Berichterstatter:

Prof. Dr. Matusch

Mitberichterstatter

Prof. Dr. Klebe

Die vorliegende Arbeit entstand am Institut für Pharmazie und  
Lebensmittelchemie der Philipps Universität Marburg  
auf Anregung und unter Leitung von

**Herrn Prof. Dr. Matusch**

Für die Anregung zu dieser Arbeit, die er durch großzügige Unterstützung stets  
gefördert hat, möchte ich Herrn Prof. Dr. Matusch an dieser Stelle sehr herzlich  
danken.

Weiterhin möchte ich Herrn Prof. Dr. Frenking für die stete Diskussionsbereit-  
schaft bei theoretischen Problemen und Herrn Dr. Kämpchen für die mir zur  
Verfügung gestellten Rechenzeiten und Speicherkapazitäten danken.  
Meinen Kolleginnen und Kollegen bin ich für das anregende Arbeitsklima  
besonders zu Dank verpflichtet.

## Inhaltsverzeichnis

1.1.	Einleitung	1
1.2.	Zielsetzung und Vorgehensweise	4
2.	Modelle zur Enantiomerenüberschußabtrennung	5
2.1.	Literaturüberblick	5
2.2.	Zusammenfassung bisheriger experimenteller Ergebnisse	7
2.3.	Modellansatz	8
2.4.	Verfahren zur Simulation chromatographischer Trennungen	8
2.5.	Modellrechnungen zur Enantiomerenüberschußabtrennung	15
2.5.1.	Systematisierung und Klassifizierung der Enantiomerenüberschußabtrennung	15
2.5.2.	Chromatogrammformen der reinen Enantiomeraufgabe	25
2.5.3.	Untersuchung des Trennverhaltens in Abhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten	30
2.5.4.	Zusammenfassung	35
2.6.	Bedeutung der Bodenzahl	37
2.7.	Eindeutigkeit der Chromatogrammsimulationen	40
3.	Berechnung diastereomerer Komplexe	42
3.1.	Vorgehensweise	42
3.2.	Verfahren	44
3.2.1.	MNDO-Methoden	44
3.2.2.	Kraftfeldverfahren	46
3.3.	Berechnung intermolekularer Wechselwirkungen mit Kraftfeld- bzw. semiempirischen Verfahren	47
3.3.1.	Benzol-Benzol-Wechselwirkungen	49
3.3.2.	Benzol-Alkan-Wechselwirkungen	53
3.3.3.	Wasserstoffbrückenbindungen	54
3.3.3.1.	Semiempirische Verfahren	55
3.3.3.2.	Kraftfeldverfahren	64
4.	Rechnungen und Simulationen zu experimentell gemessenen Chromatogrammen	67
4.0.	Definitionen zur Berechnung von Wechselwirkungsenergien	67
4.1.1.	Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung des 1,1'-Bi-2-naphthols	69
4.1.2.	Berechnung von 1,1'-Bi-2-naphthol-Komplexen	79
4.1.2.1.	1,1'-Bi-2-naphthol	79
4.1.2.2.	Binaphthol-Dimere	82
4.1.2.3.	Binaphthol-Propylamin Aggregat	85
4.1.2.4.	Binaphthol-Isopropanol Aggregat	86
4.1.2.5.	Mit Kraftfeldverfahren berechnete Binaphtholdimer-Propylamin Aggregate	87
4.1.2.6.	Mit Kraftfeldverfahren berechnete Binaphtholdimer-Isopropanol Aggregate	88



4.1.2.7. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Propylamin Aggregate	90
4.1.2.8. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Propylamin-Isopropanol Aggregate	93
4.1.2.9. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Isopropanol Aggregate	95
4.1.2.10. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Isopropanol-Isopropanol Aggregate	98
4.1.3. Vergleich der Chromatogrammsimulationen mit den AM1-Rechnungen.	100
4.2.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung des 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyls	103
4.2.2. Berechnung von 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyl-Komplexen	104
4.3.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung verschiedener N-Acyl-Aminosäureester	109
4.3.2. Berechnung von Aggregaten der N-Acyl-Aminosäureester	125
4.3.3. Vergleich der Chromatogrammsimulationen mit den AM1-Rechnungen	150
4.4.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung des Anthryltrifluorethanols und des Phenyltrifluorethanols	153
4.4.2. Berechnung der Arylcarbinol Assoziate	157
4.4.3. Vergleich der Chromatogrammsimulationen mit den AM1-Rechnungen	163
4.5.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung der Trögerschen Base	165
4.5.2. Versuche zur Berechnung der Assoziate der Trögerschen Base	167
5. Entwicklung eines Algorithmus zur Berechnung von Chromatogrammen der Enantiomerenüberschußabtrennung	170
5.1. Berechnung chromatographischer Trennungen an chiralen Phasen	170
5.2. Bisherige Verfahren zur Berechnung der Enantiomerentrennungen an achiralen Phasen	170
5.3. Verfahren zur Lösung eines Polynoms 4.Grades	172
5.3.1. Analytische Lösung eines Polynoms 4.Grades	172
5.3.2. Numerische Verfahren zur Lösung eines Polynoms 4.Grades	173
5.4. Algorithmus zur Berechnung der Gleichgewichte in einem theoretischen Boden	174
6. Durchführung semiempirischer Rechnungen	180
7. Zusammenfassung	181
Anhang A Graphische Gegenüberstellung experimenteller und simulierter Chromatogramme	185
Anhang B Abbildungen zur Energieabhängigkeit der Rotation der OH-Gruppe des Binaphthols	297
Anhang C Tabellen und Abbildungen zu den berechneten Aminosäureester-Aggregaten	305
Literaturverzeichnis	396

## 1.1. Einleitung

In zunehmendem Maße werden immer höhere Anforderungen an die Reinheit von Substanzen gestellt. Dies gilt auch für die optische Reinheit. Ihre Bedeutung ist hinreichend bekannt. Man denke nur im Bereich der Werkstoffwissenschaften an die Taktizität von Polymeren [1] und die sich daraus ergebenden Materialeigenschaften, an chemische Sensoren [2] oder aber an unterschiedliche pharmakologische Wirkungen optischer Isomere [3]. Im günstigsten und seltensten Fall kann das therapeutisch unwirksame Enantiomer nach der Verabreichung durch den Organismus in seinen optischen Antipoden überführt werden. Häufiger aber belastet es den Körper. Zeigt das Distomer gegenüber dem Eutomer unerwünschte oder gar entgegengesetzte Wirkungen, ist seine Abtrennung unvermeidbar. Das Bedürfnis, enantiomerenreine Substanzen darzustellen, ist gegeben, aber nur die weitaus wenigsten Substanzen lassen sich optisch rein synthetisieren. Die in der enantioselektiven Synthese anfallenden Produkte sind meistens mehr oder minder mit dem ungewünschten Enantiomer verunreinigt und müssen weiter aufgearbeitet werden. Die Wege, diese Enantiomerengemische in ihre chiralen Komponenten zu trennen, sind vielfältig. Sie reichen von den klassischen Methoden, z.B. der Derivatisierung mittels eines chiralen Reagenzes oder der fraktionierenden Kristallisation, über die Separation durch Enzyme oder Mikroorganismen bis zur chromatographischen Trennung. Allen diesen Methoden liegt das gleiche Prinzip zu Grunde:

Das Enantiomerengemisch wird durch ein weiteres chirales Reagenz in mehr oder weniger stabile Diastereomere überführt, die ein chemisch und physikalisch unterschiedliches Verhalten aufweisen.

Im Falle der Flüssigchromatographie sind zwei Methoden gängig:

Zum einen ist der Zusatz eines chiralen Agenzes zur mobilen Phase möglich. Der Nachteil hierbei ist jedoch, daß dieses nach der Trennung wieder entfernt werden muß.

Zum anderen kann man eine chirale stationäre Phase verwenden. Häufig muß diese aber für das gestellte Problem speziell angepaßt werden. Das heißt, es wird zuerst eine Vielzahl chiraler stationärer Phasen synthetisiert, die dann auf ihr Trennverhalten untersucht werden. Dies kann mitunter sehr zeitaufwendig sein.

Wie schon erwähnt, wird bei all diesen Methoden dem Enantiomerengemisch zur Trennung ein weiteres chirales Zentrum zur Verfügung gestellt und mittels diesem die Separierung der optischen Antipoden realisiert. Prinzipiell sollte es aber auch möglich sein, die chirale Information des optischen Antipoden im Enantiomerengemisch zu verwenden. Bedingung hierfür ist natürlich, daß die Enantiomere ausreichend miteinander wechselwirken und somit selber die für die chromatographische Trennung benötigten Diastereomere bilden. Falls in achiraler Umgebung zur Selbstassoziation zwei Teilchen herangezogen werden, entsteht ein Gemisch aus maximal drei, chemisch unterschiedlichen Substanzgruppen :

Zunächst sind die monomeren Enantiomere R und S vorhanden. Die zweite Gruppe besteht aus den homochiralen Assoziaten RR und SS. Da sie enantiomer zueinander sind, verhalten sie sich

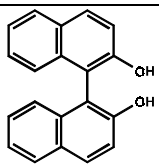
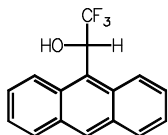
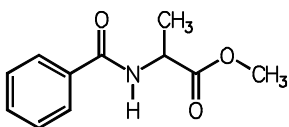
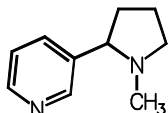
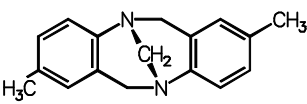
in achiraler Umgebung chemisch gleich. Als dritte Spezies sind die zu den letzteren diastereomeren, heterochiralen Komplexe RS zu nennen. Diese fünf Substanzen stehen ständig untereinander im Gleichgewicht, wodurch die theoretische Behandlung des chromatographischen Trennprozeß extrem kompliziert wird.

Im Falle einer racemischen Aufgabe kann ein derartiges Gemisch, unter ansonsten achiralen Bedingungen, nicht aufgetrennt werden, da die homochirale Fraktion zu gleichen Teilen aus RR und SS Dimeren besteht. Dagegen können die homochiralen und heterochiralen Assoziate eine, wie auch immer geartete, Trennung eines nichtracemischen Enantiomergemisches bewirken. Das unterschüssige Enantiomer wird verhältnismäßig ungleich stärker zur Bildung heterochiraler Komplexe herangezogen, so daß das Überschußenantiomer als homochirales Dimer angereichert wird. Zwar ist mit dieser Methode keine vollständige Separierung der optischen Isomere wie bei den etablierten Verfahren möglich, aber sie führt zu einer Auftrennung in eine racematartige und eine aus reinem Überschußenantiomer bestehenden Fraktion.

Die in der Literatur immer häufigeren Berichte über Enantiomerenüberschußabtrennungen unterschiedlichster Substanzen zeigen, daß dies keine Hypothese mehr ist. Die Qualität der vorgefundenen Trennungen wird ursächlich auf die Stabilität der auftretenden diastereomeren Komplexe zurückgeführt. Der Mechanismus der Trennung ist aber noch Gegenstand der wissenschaftlichen Diskussion. Im Gegensatz zu den herkömmlichen Verfahren mittels chiraler Reagenzien verbessert sich bei der Enantiomerenüberschußabtrennung die Trennwirkung, je geringer das Überschußenantiomer durch seinen optischen Antipoden verunreinigt ist [4, 5, 14]. Deshalb wird diese Methode äußerst attraktiv für die Aufarbeitung von Produkten der enantioselektiven Synthese. In der vorliegenden Arbeit soll dieser relativ neue chromatographische Trennmechanismus theoretisch näher untersucht werden.

Tabelle 1 gibt für fünf Substanzen die relativen Retentionen an verschiedenen stationären Phasen wieder. Die aufgeführten Substanzen weisen auf ganz unterschiedliche Wechselwirkungsmuster hin, wie die zuvor postulierten Dimere gebildet werden können. Sie reichen von leicht vorstellbaren Wasserstoffbrückenwechselwirkungen, wie im Falle des 1,1'-Bi-2-naphthols und des 9-Anthryltrifluorethanol, bis zu nicht ganz so offensichtlich nachvollziehbaren Dimergeometrien, wie im Falle des Nikotins oder der Trögerschen Base. Für das Aminosäurederivat Benzoyl-alaninmethylester sind Dimergeometrien unter Ausbildung von Wasserstoffbrückenbindungen vorstellbar, die denen in der Faltblattstruktur von Peptiden ähneln. Dagegen ist für die Dimerbildung des Nikotins die Protonierung des Pyrrolidinstickstoffatoms als Voraussetzung anzunehmen. Im Falle der Trögerschen Base stehen für eine Komplexbildung lediglich Dipol-Dipolwechselwirkungen sowie die nicht ganz so starken  $\pi$ - $\pi$ - und Van-der-Waals-Wechselwirkungen zur Verfügung. Man sollte hier auch die Möglichkeit einer Trimerbildung mit einem geeigneten Lösungsmittelmolekül, das die Bildung von homochiralen und heterochiralen Assoziaten vermittelt, ins Auge fassen. Wie diese Beispiele zeigen, sind die Wechselwirkungsmuster zur Dimerbildung vielfältig und eröffnen einen großen Anwendungsbereich.

Tabelle 1 Ausgewählte Beispiele für Enantiomerenüberschußabtrennungen

	Literatur	stationäre Phase	optische Reinheit der Aufgabe ee%	relative Retention $\alpha$
 1,1'-Bi-2-naphthol	[4]	Phenylphase	60	1.04
 9-Anthryltrifluorethanol	[5]	Aminphase	68	1.04
 N-Benzoyl-alaninmethylester	[4]	Dimethylamin- phase	80	1.10
 Nikotin	[6]	RP-Phase	96	nicht angegeben
 Trögersche Base	[4]	Nitrilphase	98	3.29

Falls sich die vorgefundenen experimentellen Ergebnisse rationalisieren und systematisieren lassen, wäre der Schritt von der eher zufälligen Beobachtung der Enantiomerenüberschußabtrennung zum gezielten Einsatz hin realisierbar. Unübersehbar sind die Vorteile gegenüber der Derivatisierung der stationären Phase oder dem Zusatz eines chiralen Additivs zur mobilen Phase. Den herkömmlichen Verfahren wäre dann eine adäquate Methode zur Seite gestellt.

## 1.2 Zielsetzung und Vorgehensweise

Im Rahmen dieser Dissertation sollten theoretische Modelle zur Enantiomerenüberschußabtrennung entwickelt werden, ihre Tragfähigkeit mit Hilfe von Rechnungen überprüft und dem Experiment gegenübergestellt werden. Ursprünglich war dies auf die Berechnung von Geometrien und Bildungsenthalpien möglicher diastereomerer Assoziate, die zur Trennung führen können, beschränkt. Mit Hilfe semiempirischer MO-Verfahren (molecular orbital) und Kraftfeldrechnungen wurden dann auch mögliche Modellstrukturen zur Dimerisierung berechnet. Umfangreiche Testrechnungen waren hierzu nötig. Wie es sich herausstellte, ist nicht jede Kraftfeldmethode bzw. jedes quantenchemische semiempirische Verfahren zur Wiedergabe zwischenmolekularer Wechselwirkungen geeignet. Da die Ergebnisse sich nicht zwanglos mit dem Experiment vereinbaren ließen, mußten sowohl Säulenmodelle als auch Lösungsmittelleffekte mit einbezogen werden. Die so erhaltenen thermodynamischen Daten ließen sich aber nicht mit den in der Literatur diskutierten Modellvorstellungen vereinbaren. Deshalb wurde ein neues Verfahren zur Berechnung von Chromatogrammen erarbeitet. Einerseits wurde dies durch Anpassung vorhandener Programme an die Problemstellung, andererseits durch Entwicklung neuer Algorithmen erreicht. Mit Hilfe dieses Programmes ist der direkte Vergleich experimenteller Chromatogramme und berechneter Daten möglich, wodurch die Ergebnisse der Kraftfeld- bzw. der semiempirischen Rechnungen verifiziert werden konnten. Weiterhin ergaben sich interessante Einblicke in den Mechanismus der Enantiomerenüberschußabtrennung, so daß, gegenüber den in der Literatur diskutierten Konzepten, auf Grund der Simulationen ein tragfähiges Modell zur Enantiomerenüberschußabtrennung erstellt werden konnte.

Die vorliegende Arbeit folgt nicht der chronologischen Entwicklung. Zum besseren Verständnis wird zuerst, nach einem kurzen Literaturüberblick, das hier erstellte Modell zur Enantiomerenüberschußabtrennung hergeleitet und mit Hilfe von Testsimulationen erläutert. Anschließend werden die Unterschiede dieses Verfahrens zu den in der Literatur vertretenden Konzepten dargestellt. Bevor aber dann Rechnungen zu experimentell gemessenen Enantiomerenüberschußabtrennungen diskutiert und erläutert werden können, muß zunächst die Leistungsfähigkeit der verschiedenen Kraftfeld- bzw. semiempirischen Verfahren zur Wiedergabe einiger intermolekularer Wechselwirkungen untersucht werden. Erläuterungen zu den entwickelten Verfahren und den Änderungen der verwendeten Programme sind am Ende der Arbeit zusammengestellt.

## 2. Modelle zur Enantiomerenüberschußabtrennung

### 2.1. Literaturüberblick

Bevor das von mir entwickelte Modell zur Enantiomerenüberschußabtrennung erläutert wird, soll zunächst in einem kurzen Rückblick auf die bisher in der Literatur diskutierten Vorstellungen eingegangen werden.

Die Trennung einer nichtracemischen Enantiomerenmischung an einem achiralen chromatographischen System wurde 1983 zum ersten Mal in der Literatur von Cundy und Crooks [6] beschrieben. Sie trennten die S- und R-Enantiomere des Nikotins, wovon eines radioaktiv markiert war, in eine reine Enantiomerenüberschußfraktion und eine Racematfraktion auf. Eine intramolekulare Diastereomerenbildung durch Protonierung des Pyrrolidinstickstoffatoms schlossen sie experimentell aus. Die Abtrennung des reinen Überschusses erklärten sie sich durch die Bildung homochiraler und heterochiraler Dimere. Obwohl sich die so gebildeten diastereomeren Assoziate thermodynamisch unterscheiden, nahmen sie an, daß das sich einstellende Verhältnis an homochiralen zu heterochiralen Komplexe statistisch kontrolliert sei. Für die beobachtete Enantiomerenüberschußabtrennung machten sie trotzdem die bevorzugte Bildung von homochiralen Dimeren verantwortlich. Da die Trennung nur bei sehr geringen Aufgabemengen zu beobachten war, nahmen sie für die stationäre Phase ein sehr limitiertes Unterscheidungsvermögen an und verwiesen die für die Trennung verantwortlichen Effekte in die mobile Phase. Kleine Mengen an heterochiralen Dimeren hätten eine geringe Affinität zur mobilen Phase und somit seien hauptsächlich homochirale Komplexe in der mobilen Phase gelöst. Eine Analogie zu Kristallisationsprozessen wurde angenommen, bei denen der Überschuß auch zuerst auskristallisiere.

Im Gegensatz hierzu nimmt Gil Av [7] in der zweiten eine Enantiomerenüberschußabtrennung beschreibenden Veröffentlichung aus dem Jahr 1984 an, daß die Separierung hauptsächlich durch die stationäre Phase beeinflusst werde. Er untersuchte die Enantiomerenüberschußabtrennung von N-lauroyl-valyl-tert.-butylamid, sowie von N-trifluoracetyl-valyl-valyl-cyclohexylester und N-trifluoracetyl-alanyl-glycyl-isopropylester an einer Kieselgurphase mit dem Fließmittel Ethylacetat. Im Falle des N-lauroyl-valyl-tert.-butylamide beobachtete er sogar eine Fronteluiierung einer annähernd racemischen Fraktion, der dann erst die Enantiomerenüberschußfraktion folgte. Seinen Ausführungen zufolge findet die Selbstassoziiierung lediglich in der stationären Phase statt, da eine Dimerisierung in der mobilen Phase durch das Fließmittel Ethylacetat behindert sei. Wenn das homochirale Assoziat in der stationären Phase stabiler ist, ergibt sich eine Anreicherung des Überschußenantiomers in der stationären Phase und es kommt im Extremfall zur Fronteluiierung einer Racematfraktion. Ist dagegen in der stationären Phase der heterochirale Komplex stabiler, ergibt sich seiner Ansicht nach eine Fronteluation des Überschußenantiomers. Diese Auffassung wird auch als chirale Vorbelegung bezeichnet. Das durch die Dimerisierung bedingte Trennverhalten wird hier gänzlich konträr zu Cundy und

Crooks verstanden. Dieser Gegensatz kennzeichnet alle folgenden Veröffentlichungen, die sich mit Theorien zur Enantiomerenüberschußabtrennung befassen.

Ein Jahr später beobachteten Dreiding und Tsai [8] eine Enantiomerenüberschußabtrennung bei der Aufgabe von nichtracemischen Gemischen des Wieland-Miescher Ketons<sup>1</sup>. Da sie sich schwer Wasserstoffbrückenbindungen bei der Dimerisierung vorstellen konnten, machten sie Van-der-Waals-Wechselwirkungen hierfür verantwortlich. (Leider sind keine Angaben zum Fließmittel vorhanden.) Desweiteren folgerten sie, daß Van-der-Waals-Kräfte nur bei sehr hohen Konzentrationen an Monomeren einen Effekt zeigen und deswegen eine Assoziation nur in der stationären Phase wahrscheinlich sei. Ein Nachweis der Dimere mittels NMR in der mobilen Phase gelang ihnen nicht.

Hara und Dobashi [9] konnten 1986 die Selbstassoziation des N-acetylvalyl tert-butylesters in CCl<sub>4</sub> spektroskopisch nachweisen und berichteten 1987 [10] auch von der entsprechenden Enantiomerenüberschußabtrennung. Die spektroskopischen Daten weisen auf eine höhere Stabilität der homochiralen Dimere hin. Da eine Frontelutierung des reinen Überschußenantiomers experimentell vorgefunden wurde, folgerten sie, daß das Trennverhalten durch die Dimerisierung in der mobilen Phase bestimmt wird. Hara und Dobashi postulierten, daß lediglich die thermodynamische Stabilität der Dimere die Trennung bewirke. Die von Cundy und Crooks hervorgehobene Bedeutung der Adsorptions- und Desorptionsprozesse wird ausdrücklich negiert. Da Hara und Dobashi auf NMR- und IR- Spektren zur Erstellung ihres theoretischen Modells zurückgreifen konnten, ist ihr Ansatz als der bisher experimentell fundierteste anzusehen.

Coors [5, 14] konnte 1988 erstmalig eine temporäre chirale Belegung der stationären Phase experimentell ausschließen. Diese Befunde wurden auch von Heinzerling [4] zuverlässig abgesichert und erweitert.

Das Problem der Enantiomerenüberschußabtrennung gingen Schurig und Jung [11] 1992 von der theoretischen Seite an. Mittels eines von Schurig und Jung entwickelten Simulationsprogrammes zur Berechnung von Chromatogrammen versuchten sie, die Trennvorgänge zu simulieren. Leider wählten sie ihre Simulationsbedingungen so unrealistisch (zum Teil verursacht durch Schwächen des Algorithmus im verwendeten Programm), daß keine aussagekräftigen Schlüsse gezogen werden konnten. Desweiteren wurden in ihren Ansätzen lediglich die schon dargestellten theoretischen Vorstellungen von Gil-Av berücksichtigt. Es konnte aber gezeigt werden, daß allein auf Grund der Dimerenbildung schon eine Enantiomerenüberschußabtrennung möglich ist. Im Vergleich mit den experimentell gemessenen Chromatogrammen zeigten die Simulationen eine prinzipiell ähnliche Struktur.

1994 stellten Schurig und Gil-Av [12] ein weiteres Modell zur Beschreibung der Enantiomerenüberschußabtrennung vor. Es basiert auf sogenannten gemittelten, konzentrationsunabhängigen Kapazitätsfaktoren (= theoretisch definierte Größen, die keinerlei experimentellen

---

<sup>1</sup> 8a-Methyl-3,4,8,8a-tetrahydro-1,6[2H,7H]-naphthalindion

Bezug haben) mit denen drei Szenarien diskutiert werden. Das Modell ist jedoch auf experimentelle Chromatogramme nicht anwendbar und basiert lediglich auf Plausibilitätsüberlegungen. Im ersten Szenarium wird eine ausschließliche Dimerisierung in der mobilen Phase angenommen, und den Autoren folgend sollte es zu einer Frontelung der Racematfraktion kommen. Das zweite Szenarium fordert eine ausschließliche Dimerisierung in der stationären Phase. Die resultierenden Überschußabtrennungen sollen eine Frontelung entsprechend den Stabilitäten der homochiralen bzw. heterochiralen Dimere zeigen, wie es schon von Gil-Av in [7] postuliert wurde. Das dritte Szenarium beschreibt diverse Mischformen zwischen den beiden vorhergehenden.

In der bis jetzt letzten Veröffentlichung [13], 1996, versucht A.Kurganov die Vorgänge bei der Enantiomerenüberschußabtrennung unter Vernachlässigung der Bildung heterochiraler Dimere zu erfassen.

Alle weiteren Veröffentlichungen zur Enantiomerenüberschußabtrennung [15, 16<sup>1</sup>, 17, 18] schließen sich in ihren theoretischen Erklärungsversuchen einer der hier dargestellten Auffassungen an. Meistens berichten sie nur von neuen Beispielen der Enantiomerenüberschußabtrennung. Zusammenfassend muß festgestellt werden, daß sich mit den bisherigen Modellen weder qualitative noch quantitative Voraussagen machen lassen.

## **2.2. Zusammenfassung bisheriger experimenteller Ergebnisse**

Die experimentell vorgefundenen Beobachtungen und Gesetzmäßigkeiten zur Enantiomerenüberschußabtrennung sind im nächsten Absatz zusammengefaßt. Sie sind größtenteils der Arbeit von Heinzerling [4] entnommen, der einige Substanzgruppen systematisch untersucht.

1. Die Aufgabe einer racemischen Mischung führt zu keiner Trennung.
2. Die Aufgabe einer nichtracemischen Mischung bedingt eine Auftrennung in eine Enantiomerenüberschußfraktion und eine racematartige Fraktion. Im günstigsten Fall ist eine Peakseparierung zu beobachten.
2. 1. Mit steigender optischer Reinheit der Aufgabe ergibt sich eine Verbesserung des Trennfaktors.
2. 2. Mit steigender Aufgabemenge verbessert sich der Trennfaktor.
2. 3. Mit steigender Temperatur verschlechtert sich die Trennleistung.
3. Die Trennung ist nicht nur von der Art der stationären Phase abhängig, sondern auch von ihrer Beschaffenheit (z.B. Porengröße, Vorgeschichte der Säule).
4. Die Erhöhung der Bodenzahl, daß heißt die Verlängerung der Säule, folgt nicht den Gesetzmäßigkeiten der normalen Adsorptionschromatographie [19].
5. Die Enantiomerenüberschußabtrennung ist nicht nur auf die Flüssigchromatographie beschränkt.

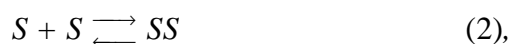
---

<sup>1</sup> In diesem Übersichtsartikel werden zum Teil falsche Ergebnisse aus der Literatur wiedergegeben.



### 2.3. Modellansatz

Das hier erstellte Modell der Enantiomerenüberschußabtrennung geht von der Bildung von Dimeren aus. Die zu trennende Substanz muß also zur Selbstkomplexierung befähigt sein. In Abhängigkeit von der Konzentration an Monomeren entstehen Dimere, die im Vergleich zu den Monomeren eine geringere Affinität zur stationären Phase aufweisen. Aus den Monomeren (R, S) können einerseits die homochiralen Assoziate (RR, SS)



und andererseits heterochirale Assoziate (RS) entstehen



Es wird zunächst angenommen, daß die unterschiedlichen Stabilitäten (freie Energien  $\Delta G$ ) der zueinander diastereomeren Assoziate, RR bzw. SS ( $\Delta G_{RR} = \Delta G_{SS}$ ) und RS ( $\Delta G_{RS}$ ) die Art der Trennung bestimmen. In erster Näherung könnte man die Dimerisierungsenergieunterschiede als Kriterium für das chromatographische Verhalten heranziehen [6, 7].

Ist in der mobilen Phase  $\Delta G_{RS} < \Delta G_{RR} = \Delta G_{SS}$ , so wird ein Enantiomerengemisch zuerst eluiert. Dagegen kommt es zur Frontelution des reinen Überschußenantiomers, falls die homochiralen Dimere stabiler sind als die heterochiralen, also  $\Delta G_{RR} = \Delta G_{SS} < \Delta G_{RS}$ . Die Güte der Trennung, ein Maß hierfür ist die relative Retention  $\alpha$ , wird hauptsächlich von dem Betrag der Dimerisierungsenergieunterschiede bestimmt [4, 5].

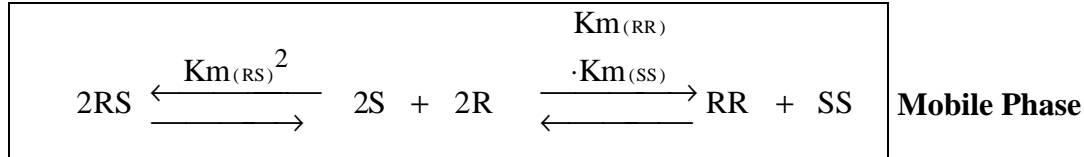
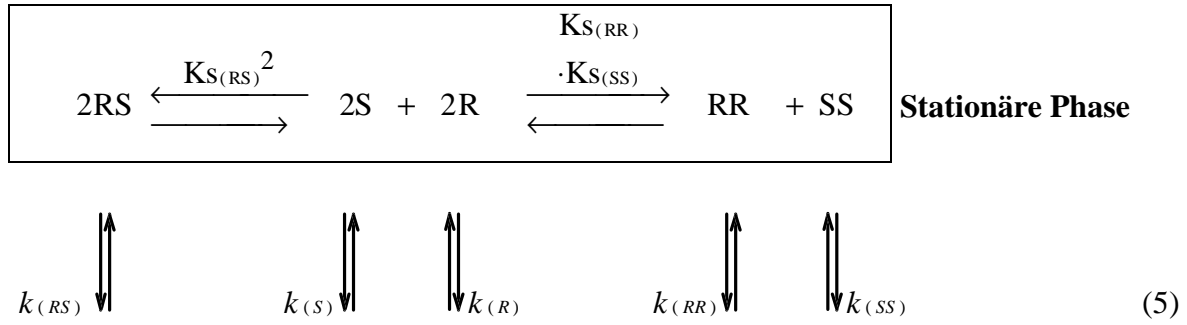
$$\alpha = \frac{Rt_{\max(RS)} - t_0}{Rt_{\max(RR)} - t_0} \quad (4)$$

(hier für die Frontelution des Überschußenantiomers formuliert mit der Retentionszeit des Überschußenantiomers  $Rt_{\max(RR)}$ , der Retentionszeit des Racemates  $Rt_{\max(RS)}$  und der Totzeit des Systems  $t_0$ )

### 2.4. Verfahren zur Simulation chromatographischer Trennungen

Zur Überprüfung dieser Modellvorstellung wurde der chromatographische Trennvorgang mit Hilfe eines eigens hierzu entwickelten Programms auf der Grundlage des theoretischen Bodenmodells simuliert. Weitere Einzelheiten zum verwendeten Algorithmus werden im Kapitel 5 noch näher erläutert. An dieser Stelle werden, in einem groben Überblick, die Vorgehensweise geschildert und die zum Verständnis notwendigen Gleichungen und Definitionen hergeleitet.

Eine chromatographische Säule kann man hypothetisch in ihre theoretischen Trennböden unterteilen. In jedem dieser Trennböden hat man im Rahmen der Enantiomerenüberschußabtrennung folgendes Gleichgewichtssystem anzunehmen.



Die Gleichgewichte zwischen den Monomeren bzw. Dimeren der mobilen (Index <sub>(m)</sub>) und der stationären Phase (Index <sub>(s)</sub>) werden durch die jeweiligen Retentions- sowie Totzeiten beschrieben. Hieraus resultieren die entsprechenden Kapazitätsfaktoren  $k_{(x)}$ . (Der Index <sub>(x)</sub> steht für die jeweilige Teilchenart.)

Phasenverhältnis  $\beta = \frac{\text{Volumen mobile Phase}}{\text{Volumen stationäre Phase}}$  (6)

$$RS_{(m)} \xrightleftharpoons{k_{(RS)}} RS_{(s)} \quad k_{(RS)} = \frac{[RS_{(s)}]}{[RS_{(m)}]} = \beta \frac{\text{Retentionszeit}(RS) - \text{Totzeit}}{\text{Totzeit}} \quad (7)$$

$$RR_{(m)} \xrightleftharpoons{k_{(RR)}} RR_{(s)} \quad k_{(RR)} = \frac{[RR_{(s)}]}{[RR_{(m)}]} = \beta \frac{\text{Retentionszeit}(RR) - \text{Totzeit}}{\text{Totzeit}} \quad (8)$$

$$SS_{(m)} \xrightleftharpoons{k_{(SS)}} SS_{(s)} \quad k_{(SS)} = \frac{[SS_{(s)}]}{[SS_{(m)}]} = \beta \frac{\text{Retentionszeit}(SS) - \text{Totzeit}}{\text{Totzeit}} \quad (9)$$

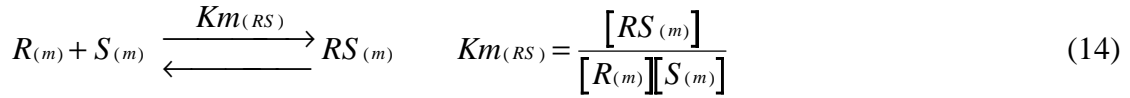
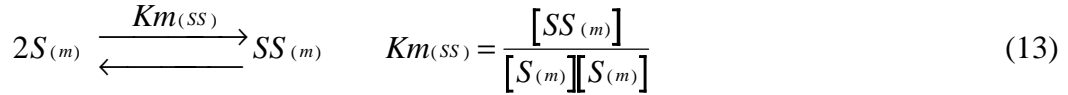
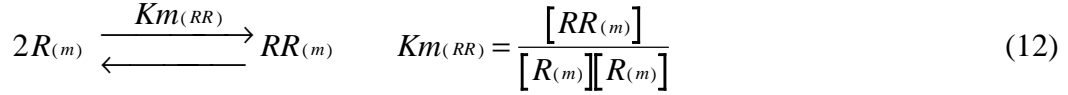
$$R_{(m)} \xrightleftharpoons{k_{(R)}} R_{(s)} \quad k_{(R)} = \frac{[R_{(s)}]}{[R_{(m)}]} = \beta \frac{\text{Retentionszeit}(R) - \text{Totzeit}}{\text{Totzeit}} \quad (10)$$

$$S_{(m)} \xrightleftharpoons{k_{(S)}} S_{(s)} \quad k_{(S)} = \frac{[S_{(s)}]}{[S_{(m)}]} = \beta \frac{\text{Retentionszeit}(S) - \text{Totzeit}}{\text{Totzeit}} \quad (11)$$

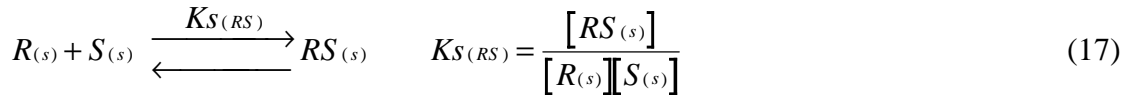
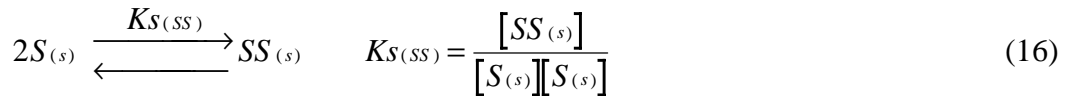
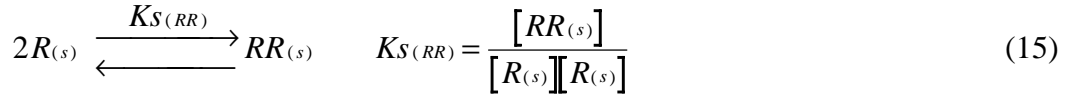
Zum besseren Verständnis wird hier noch einmal der Unterschied zwischen den in den Definitionen (7)-(11) verwendeten Retentionszeiten  $Rt_{(x)}$  und den im Chromatogramm beobachteten Retentionszeiten  $Rt_{\max(x)}$  hervorgehoben.  $Rt_{(x)}$  sind die Retentionszeiten der entsprechenden Spezies ohne Berücksichtigung der Reaktionen in der stationären bzw. mobilen Phase. Sie werden experimentell nicht beobachtet und sind deshalb rein theoretische Größen.  $Rt_{\max(x)}$  ist dagegen die entsprechende Retentionszeit des Konzentrationsmaximum im

Chromatogramm und damit auch experimentell erfaßbar. Der Wert von  $Rt_{\max(x)}$  unterscheidet sich auf Grund der in (5) dargestellten vielfältigen Reaktionsmöglichkeiten von  $Rt_{(x)}$ .

Für die mobile Phase ergeben sich dann die Gleichgewichtskonstanten  $Km_{(x)}$  (Der Index  $(x)$  steht für Teilchenart.):



Den Dimerisierungen in der stationären Phase werden die Gleichgewichtskonstanten  $Ks_{(x)}$  zugeordnet. (Der Index  $(x)$  steht für Teilchenart.)



Im Gegensatz zu den bisherigen Programmen, z.B. dem von Schurig und Jung [11], wird hier für jeden Trennboden ein Gleichgewichtszustand angenommen, wie es die Trennbodendefinition fordert [19]. Die mathematische Beschreibung des in (5) dargestellten chemischen Gleichungssystems führt dann durch sukzessive Substitution der Gleichgewichtskonzentrationen mit Hilfe der Definitionen (7)-(17) zu einem Polynom 4.Grades, das hier hergeleitet werden soll.

Die Konzentration  $C(R)_{(m)}$  an R-Teilchen in der mobilen Phase eines Boden berechnet sich aus

$$C(R)_{(m)} = 2[RR_{(m)}] + [RS_{(m)}] + [R_{(m)}] \quad (18).$$

Analoges gilt für die Konzentration  $C(S)_{(m)}$  an S-Teilchen in der mobilen Phase

$$C(S)_{(m)} = 2[SS_{(m)}] + [RS_{(m)}] + [S_{(m)}] \quad (19).$$

Unter Berücksichtigung der Gleichungen (12) und (14) in (18) bzw. (13) und (14) in (19) folgt dann

$$C(R)_{(m)} = 2 Km_{(RR)} [R_{(m)}] [R_{(m)}] + Km_{(RS)} [R_{(m)}] [S_{(m)}] + [R_{(m)}] \quad (20)$$

$$C(S)_{(m)} = 2 Km_{(SS)} [S_{(m)}] [S_{(m)}] + Km_{(RS)} [R_{(m)}] [S_{(m)}] + [S_{(m)}] \quad (21)$$

Desweiteren verhalten sich die R- und S-Enantiomere chemisch gleich und es gilt deshalb:

$$Km_{(RR)} = Km_{(SS)} \quad (22)$$

$$Ks_{(RR)} = Ks_{(SS)} \quad (23)$$

$$k_{(R)} = k_{(S)} \quad (24)$$

$$k_{(RR)} = k_{(SS)} \quad (25)$$

Somit kann  $Km_{(SS)}$  in Gleichung (21) durch  $Km_{(RR)}$  substituiert werden.

$$C(S)_{(m)} = 2 Km_{(RR)} [S_{(m)}] [S_{(m)}] + Km_{(RS)} [R_{(m)}] [S_{(m)}] + [S_{(m)}] \quad (26)$$

Die Konzentrationen  $C(R)_{(s)}$  an R-Teilchen und  $C(S)_{(s)}$  an S-Teilchen in der stationären Phase eines Bodens ergeben sich analog

$$C(R)_{(s)} = 2 [RR_{(s)}] + [RS_{(s)}] + [R_{(s)}] \quad (27)$$

$$C(S)_{(s)} = 2 [SS_{(s)}] + [RS_{(s)}] + [S_{(s)}] \quad (28)$$

Einsetzen der Gleichung (15) und (17) in (27), bzw. (16), (17) und (23) in (28) führt zu

$$C(R)_{(s)} = 2 Ks_{(RR)} [R_{(s)}] [R_{(s)}] + Ks_{(RS)} [R_{(s)}] [S_{(s)}] + [R_{(s)}] \quad (29)$$

$$C(S)_{(s)} = 2 Ks_{(RR)} [S_{(s)}] [S_{(s)}] + Ks_{(RS)} [R_{(s)}] [S_{(s)}] + [S_{(s)}] \quad (30)$$

Auf Grund des Prinzips der Mikroreversibilität muß für die zwei Kreisprozesse in Gleichung (5) gelten

$$Ks_{(RR)} Ks_{(SS)} = \frac{Km_{(RR)} Km_{(SS)} k_{(RR)} k_{(SS)}}{k_{(R)}^2 k_{(S)}^2} \quad (31)$$

und ebenso

$$Ks_{(RS)}^2 = \frac{Km_{(RS)}^2 k_{(RS)}^2}{k_{(R)}^2 k_{(S)}^2} \quad (32)$$

Unter Berücksichtigung der Beziehungen (22) - (25) vereinfacht sich Gleichung (31)

$$Ks_{(RR)} = Km_{(RR)} \frac{k_{(RR)}}{k_{(R)}^2} \quad (33)$$

und auch (32) zu

$$Ks_{(RS)} = Km_{(RS)} \frac{k_{(RS)}}{k_{(R)}^2}. \quad (34).$$

Mit Hilfe der Relationen (33), (10) bzw. (11) kann die Konzentration  $C(R)_{(s)}$  an R-Teilchen, bzw. die Konzentration  $C(S)_{(s)}$  an S-Teilchen in der stationären Phase eines Bodens durch die

der R- bzw S-Teilchen der mobilen Phase ausgedrückt werden, so daß für Gleichung (29) bzw. (30) folgt:

$$C(R)_{(s)} = 2 K m_{(RR)} k_{(RR)} [R_{(m)}] [R_{(m)}] + K m_{(RS)} k_{(RS)} [R_{(m)}] [S_{(m)}] + k_{(R)} [R_{(m)}] \quad (35)$$

$$C(S)_{(s)} = 2 K m_{(RR)} k_{(RR)} [S_{(m)}] [S_{(m)}] + K m_{(RS)} k_{(RS)} [R_{(m)}] [S_{(m)}] + k_{(R)} [S_{(m)}] \quad (36)$$

Der Gesamteinhalt C(R) eines Bodens an R-Teilchen berechnet sich dann aus den R-Teilcheninhalten der stationären und der mobilen Phase, das heißt durch Addition von Gleichung (35) und (20) :

$$\begin{aligned} C(R) = & 2 K m_{(RR)} ( 1 + k_{(RR)} ) [R_{(m)}] [R_{(m)}] \\ & + K m_{(RS)} ( 1 + k_{(RS)} ) [R_{(m)}] [S_{(m)}] \\ & + ( 1 + k_{(R)} ) [R_{(m)}] \end{aligned} \quad (37)$$

Entsprechendes gilt für den Gesamteinhalt C(S) eines Bodens an S-Teilchen

$$\begin{aligned} C(S) = & 2 K m_{(RR)} ( 1 + k_{(RR)} ) [S_{(m)}] [S_{(m)}] \\ & + K m_{(RS)} ( 1 + k_{(RS)} ) [R_{(m)}] [S_{(m)}] \\ & + ( 1 + k_{(R)} ) [S_{(m)}] \end{aligned} \quad (38)$$

Aus Gründen der Übersicht werden folgende Substitutionen eingeführt:

$$a = K m_{(RR)} ( 1 + k_{(RR)} ) \quad (39)$$

$$b = K m_{(RS)} ( 1 + k_{(RS)} ) \quad (40)$$

$$c = ( 1 + k_{(R)} ) \quad (41)$$

Löst man das sich aus den Gleichung (37) und (38) resultierende gekoppelte Gleichungssystem (42) -(43)

$$2a [R_{(m)}]^2 + b [R_{(m)}] [S_{(m)}] + c [R_{(m)}] = C(R) \quad (42)$$

$$2a [S_{(m)}]^2 + b [R_{(m)}] [S_{(m)}] + c [S_{(m)}] = C(S) \quad (43),$$

so folgt ein Polynom vierten Grades (42), aus dessen Lösungen sich die Gleichgewichtskonzentration an S-Teilchen eines theoretischen Bodens bei Vorgabe von C(R) und C(S) berechnen lassen.

$$\begin{aligned} & 2a(4a^2 - b^2)[S]^4 \\ & + (8a^2c - 2ab - b^2c)[S]^3 \\ & + (2ac - bc - 8a^2cC(S) + b^2C(S) - b^2C(R))[S]^2 \\ & + (bC(S) - 4aC(S))[S] \\ & + 2a(C(S))^2 = 0 \end{aligned} \quad (44)$$

Die entsprechenden Rücksubstitutionen ermöglichen dann die Berechnung aller Gleichgewichtskonzentrationen in einem theoretischen Boden.

Zur Simulation eines Chromatogramms setzt man in den ersten Trennboden die Konzentrationen der Aufgabemengen ein, berechnet das sich einstellende Gleichgewicht, transportiert den Inhalt der mobilen Phase einen Boden weiter und setzt die Konzentrationen der mobilen Phase des ersten Bodens gleich null, das bedeutet, daß man dem System neues Fließmittel zuführt. Anschließend werden für alle Böden erneut die sich einstellenden Gleichgewichte berechnet und die Inhalte der mobilen Phase jeweils einen Boden weitertransportiert. Das simulierte Chromatogramm ergibt sich dann aus den Inhalten der mobilen Phase des letzten Bodens vor dem Weitertransport.

Für derartige Simulationen ist lediglich die Kenntnis von den Gleichgewichtskonstanten, der Totzeit  $t_0$ , dem Säulenvolumen  $V$ , dem Phasenverhältnis  $\beta$  und der Bodenzahl des Systems notwendig. Die Anzahl der benötigten Gleichgewichtskonstanten reduziert sich von 11 auf 7, da sich die R- und S-Enantiomere chemisch gleich verhalten. Auf Grund des Prinzips der Mikroreversibilität wird für jeden Kreisprozeß eine weitere Konstante durch die anderen vorgegeben. Somit werden zur Lösung der Gleichung (44) nur 5 Gleichgewichtskonstanten benötigt. In den hier durchgeführten Simulationen wurden  $k_{(R)}$ ,  $k_{(RR)}$ ,  $k_{(RS)}$ ,  $Km_{(RR)}$ ,  $Km_{(RS)}$  verwendet.

Die Beziehung

$$K = \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT}\right) \quad (45)$$

erlaubt aus den Gleichgewichtskonstanten die entsprechenden freien Energien  $\Delta G$  zu berechnen, die auch aus quantenchemischen oder Kraftfeldrechnungen zugänglich sind. Damit ist ein direkter Vergleich zwischen experimentell gemessenen und theoretisch berechneten Chromatogrammen möglich. Fernerhin lassen sich nun auch mit Hilfe der freien Energien theoretische Chromatogramme erstellen, die man mit dem Experiment vergleichen kann.

Zunächst aber sollen die grundsätzlichen Einflüsse der verschiedenen Gleichgewichtskonstanten auf das chromatographische Trennverhalten hin untersucht werden.

Abbildung 1 : Testsimulation 1 (verwendete Parameter siehe Tabelle 2 )

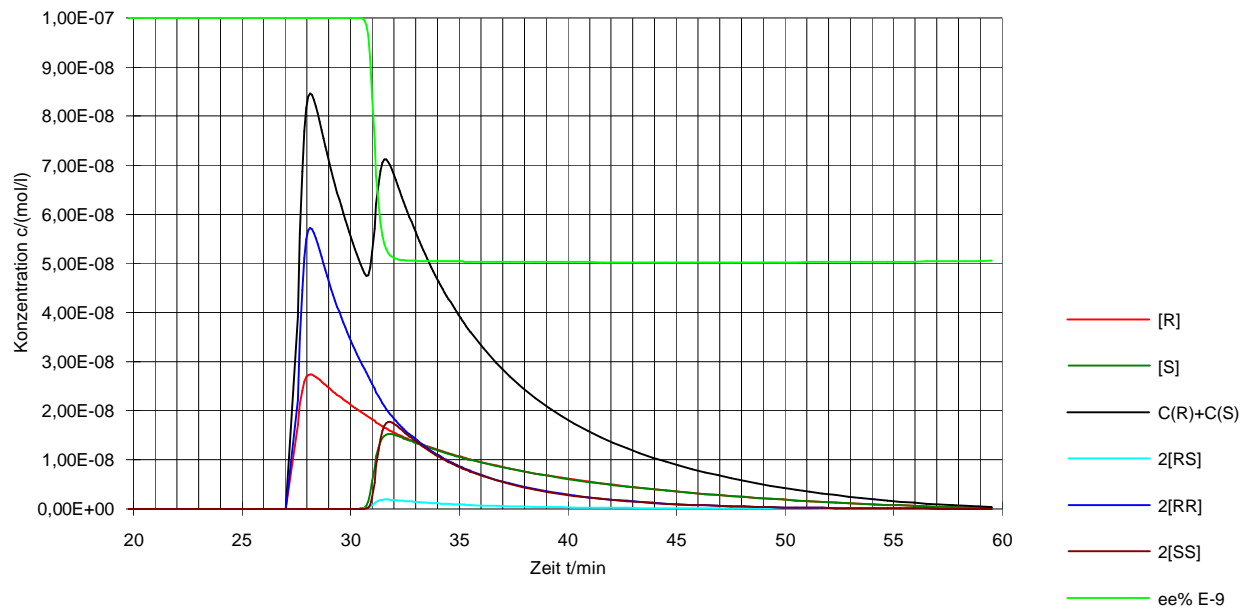


Abbildung 2 : Testsimulation 2 (verwendete Parameter siehe Tabelle 2 )

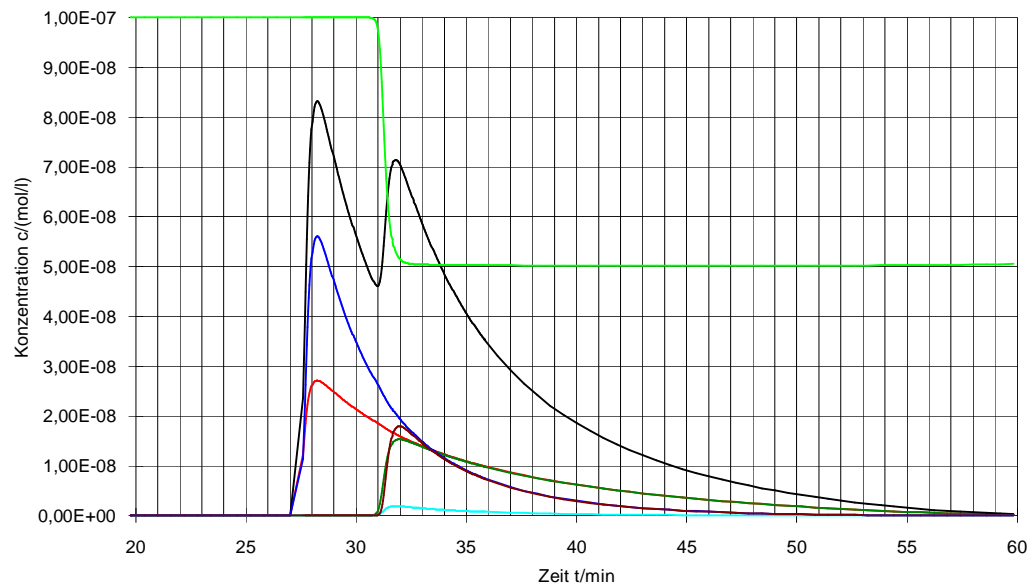
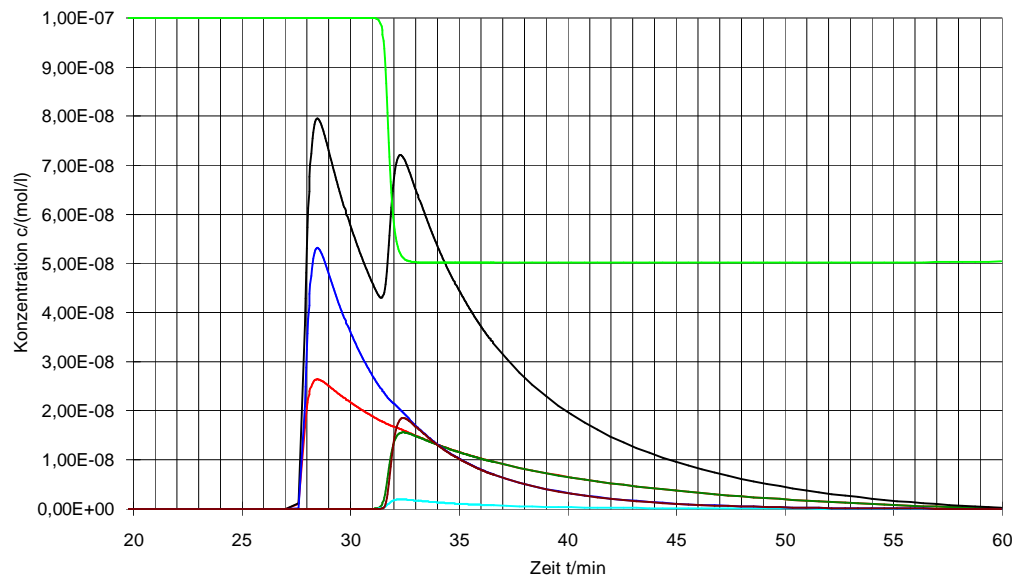


Abbildung 3 : Testsimulation 3 (verwendete Parameter siehe Tabelle 2 )



## 2.5. Modellrechnungen zur Enantiomerenüberschußabtrennung

### 2.5.1. Systematisierung und Klassifizierung der Enantiomerenüberschußabtrennung

In diesem Kapitel sollen durch Variation der verschiedenen Gleichgewichtskonstanten bzw. Kapazitätsfaktoren alle prinzipiell möglichen Erscheinungsbilder der Enantiomerenüberschußabtrennung hergeleitet werden. Darüber hinaus erlauben die verwendeten Simulationsparameter eine Klassifizierung der verschiedenen Chromatogrammformen. In den Testsimulationen wird ein Parametersatz benutzt, der den Werten der später noch zu behandelnden Chromatogramme des 1,1'-Bi-2-naphthols sehr ähnlich ist. Der Tabelle 2 sind die verwendeten Konstanten zu entnehmen. Um den Vergleich mit der Simulation zu erleichtern, wurden nicht die Kapazitätsfaktoren, sondern die entsprechenden Retentionszeiten  $Rt_{(x)}$  (der Index x steht für die Teilchenart) aufgeführt.

Tabelle 2 : Parameter zu den Testsimulationen 1-3

Test-simulation	$Rt_{(RS)}$ /min	$Rt_{(RR)}$ /min	$Rt_{(R)}$ /min	$Km_{(RR)}$ /(l/mol)	$Km_{(RS)}$ /(l/mol)	Maximum 1 /min	Maximum 2 /min	$\alpha$
1	20.3	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	28.07	31.5	1.13
2	24.0	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	28.13	31.9	1.15
3	45.0	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	28.46	32.3	1.15

Sonstige Parameter:

Böden : 500,  $t_0$  : 3min,  $\beta$  : 1, V : 3.14 ml, Aufgabemenge  $n_R$  :  $4.68 \cdot 10^{-7}$  mol,  $n_S$  :  $2.31 \cdot 10^{-7}$  mol

Abbildung 1 zeigt eine Simulation, deren Parameterauswahl den eingangs geforderten Modellbedingungen für eine Enantiomerenüberschußabtrennung entspricht :  $k_{(RR)}, k_{(RS)} < k_{(R)}$ .

Mit  $Km_{(RR)} > Km_{(RS)}$  kommt es zur Fronteluation des reinen Überschußenantimomers. Im Gegensatz zu den experimentellen Beobachtungen [4] ist das Zwischenminimum schon mit Racemat verunreinigt.

Die Erhöhung der Affinität der heterochiralen Dimere zur stationären Phase ( siehe Tabelle 2 : Simulation 2, 3 und Abb.: 2, 3) führt zu geringfügigen Änderungen im Trennverhalten. Die Peakspitze des reinen Überschußenantimomers, sowie der Fuß der Racematkurve werden um weniger als eine Minute verzögert. Dagegen wird der Racematpeak in der Summenkurve stärker zurückgehalten, was durch den flacheren Abfall der 2[RR]- und [R]-Kurve bei höherem  $k_{(RS)}$  bedingt wird. Der Konzentrationsanstieg durch die Racematfraktion kann bei flacherem Abfall der Enantiomerenüberschußkurven in der Summenkurve länger kompensiert werden oder sogar ganz verdeckt werden. Es gibt keine direkte Korrelation zwischen den Maxima der Racematkurve und der Summenkurve. Die vom Experimentator gemessene relative Retention  $\alpha$  erlaubt deshalb auch keinen Einblick in die wirklichen Trennverhältnisse. Dieser Sachverhalt wird auch bei vielen experimentell gemessenen Chromatogrammen (z.B. Anthryltrifluor-



Abbildung 4 : Testsimulation 4 (verwendete Parameter siehe Tabelle 3 )

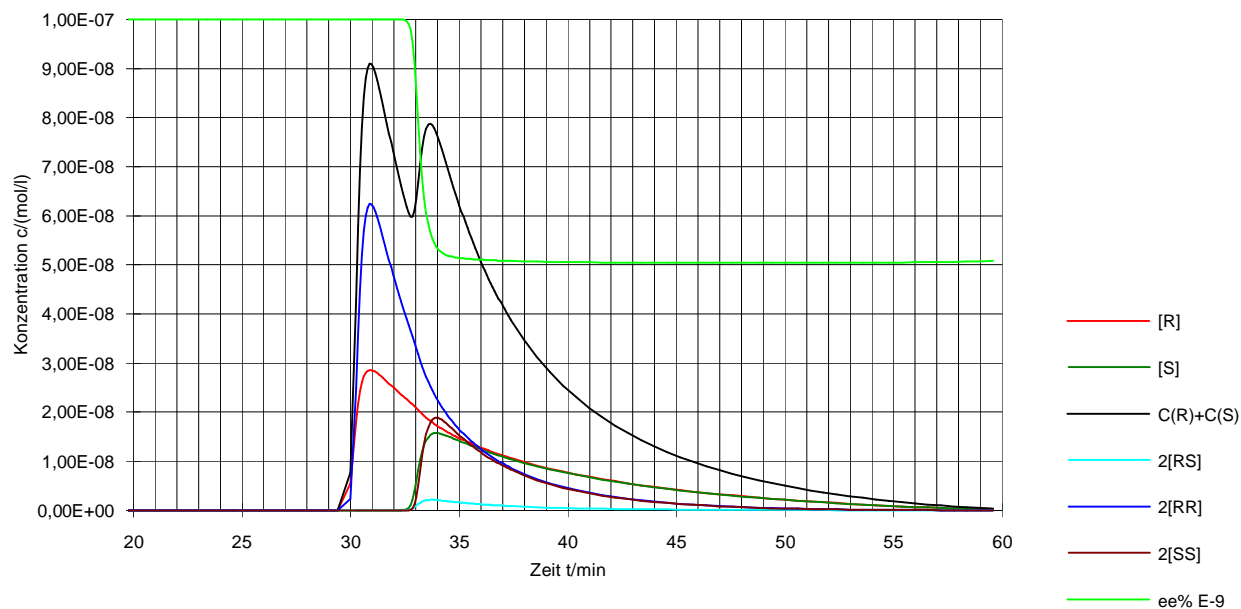


Abbildung 5 : Testsimulation 5 (verwendete Parameter siehe Tabelle 3 )

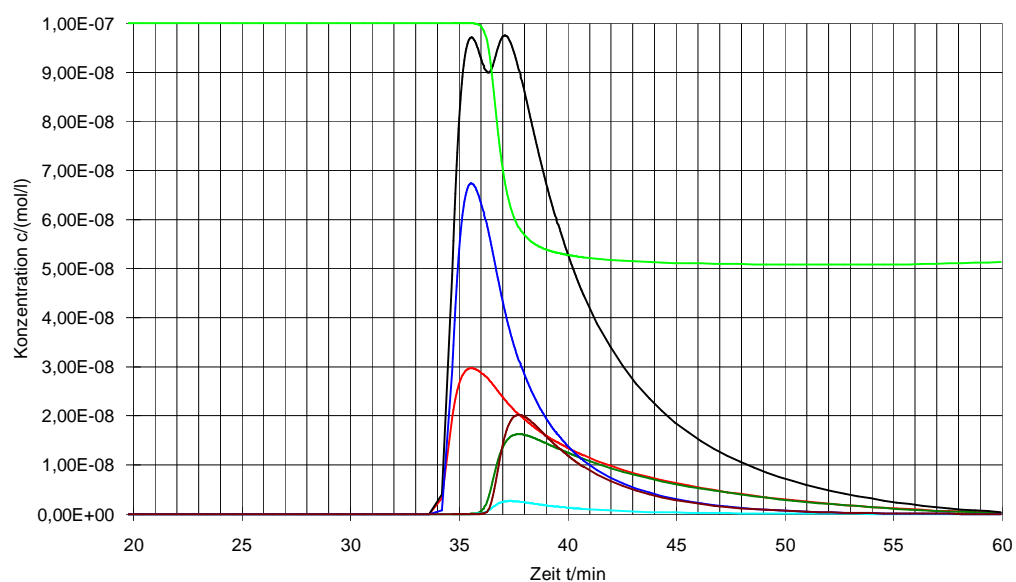
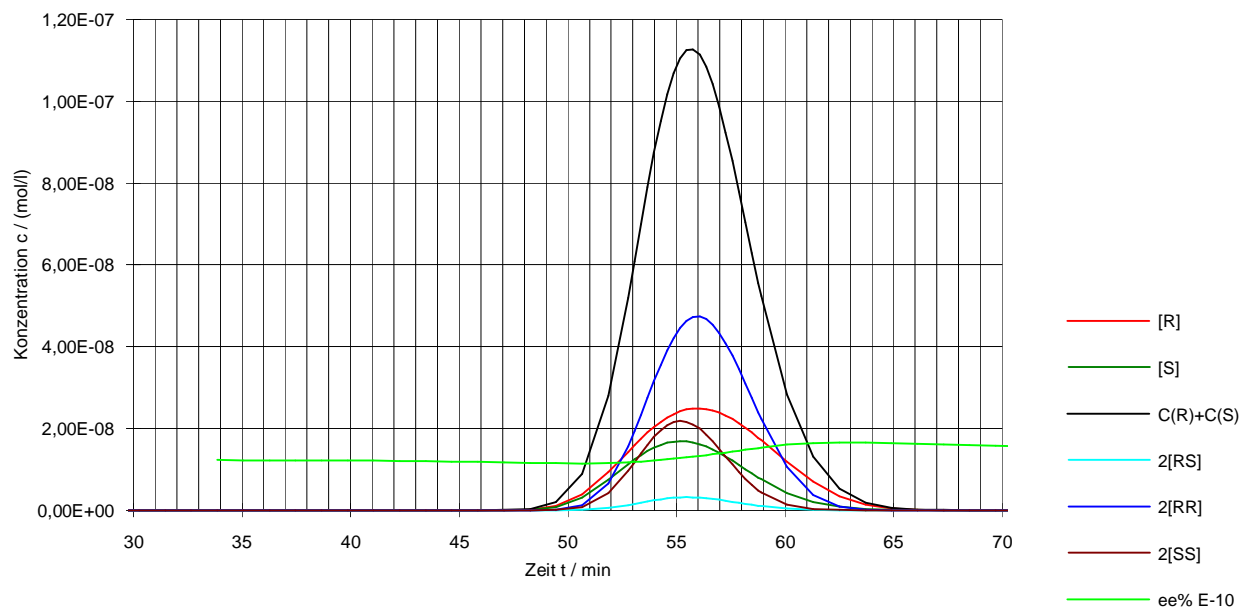


Abbildung 6 : Testsimulation 6 (verwendete Parameter siehe Tabelle 3 )



ethanol auf Aminphase [4]) beobachtet. Obwohl eine Peakseparierung vorliegt, wurden Racematanteile im Enantiomerenüberschußpeak nachgewiesen.

Erhöht man dagegen im Vergleich zur Simulation 1 die Retention der homochiralen Dimere, so werden die Änderungen im Trennverhalten sehr viel drastischer. In Abbildung 4-6 sind die Chromatogramme bei sukzessiver Erhöhung der  $R_{t(RR)}$ -Werte wiedergegeben. Die zugehörigen Parameter enthält Tabelle 3.

Tabelle 3 : Parameter zu den Testsimulationen 4-9

Test-Simulation	$R_{t(RS)}$ /min	$R_{t(RR)}$ /min	$R_{t(R)}$ /min	$K_{m(RR)}$ /(l/mol)	$K_{m(RS)}$ /(l/mol)	Maximum 1 /min	Maximum 2 /min	$\alpha$
4	20.3	24.0	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	30.9	33.5	1.09
5	23.3	35.0	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	35.5	37.2	1.05
6	20.3	57.0	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	55.66	'55.66'	'1.00'
7	20.3	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^4$	27.35	28.75	1.06
8	-	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	-	26.49		
9	20.3	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^4$	27.72		

Sonstige Parameter:

Böden : 500 ;  $t_0$  : 3min ;  $\beta$  : 1 V : 3.14 ml

Simulation 4 - 6 : Aufgabemenge  $n_R$  :  $4.68 \cdot 10^{-7}$  mol  $n_S$  :  $2.31 \cdot 10^{-7}$  mol

Simulation 8 Aufgabemenge  $n_R$  :  $6.99 \cdot 10^{-7}$  mol

Simulation 9 Aufgabemenge  $n_R = n_S$  :  $3,50 \cdot 10^{-7}$  mol

Die relative Retention  $\alpha$  sinkt von 1.09 auf 1. Trotz der hohen Affinität der homochiralen Assoziate zur stationären Phase bleibt es aber entweder bei der schon vorher festgestellten Frontelution des reinen Überschußenantiomers oder es wird kein Trenneffekt beobachtet (siehe Simulation 6). Durch die Steigerung der Retentionszeit für die homochiralen Dimere wird der Trenneffekt sukzessive verschlechtert. Im Gegensatz zum Kapazitätsfaktor  $k_{(RS)}$  hat die Variation des Kapazitätsfaktor  $k_{(RR)}$  einen entscheidenden Einfluß auf das Trennverhalten. Anscheinend wird durch den hohen Dimerisierungsgrad der homochiralen Komplexe die Retention der Racematkurve vorherbestimmt. Trotz geringer Retention werden die heterochiralen Dimere, indem sie in homochirale Assoziate übergehen, fortlaufend ausgebremst. Eine Umkehr des Trennverhaltens zur Frontelution eines Enantiomerengemisches kann nicht durch Änderung der Kapazitätsfaktoren erreicht werden. Auch wenn man ausgehend vom Parametersatz der Simulation 6, darüber hinaus die Retentionszeit der heterochiralen Dimere unter 4 min ( $k_{(RS)} < 1$ ) erniedrigt, kommt es zu keiner Trennung. Eine Frontelution eines Enantiomerengemisches kann anscheinend nur durch Änderung der Dimerstabilitäten erreicht werden.

Abbildung 7 : Testsimulation 7 (verwendete Parameter siehe Tabelle 3 )

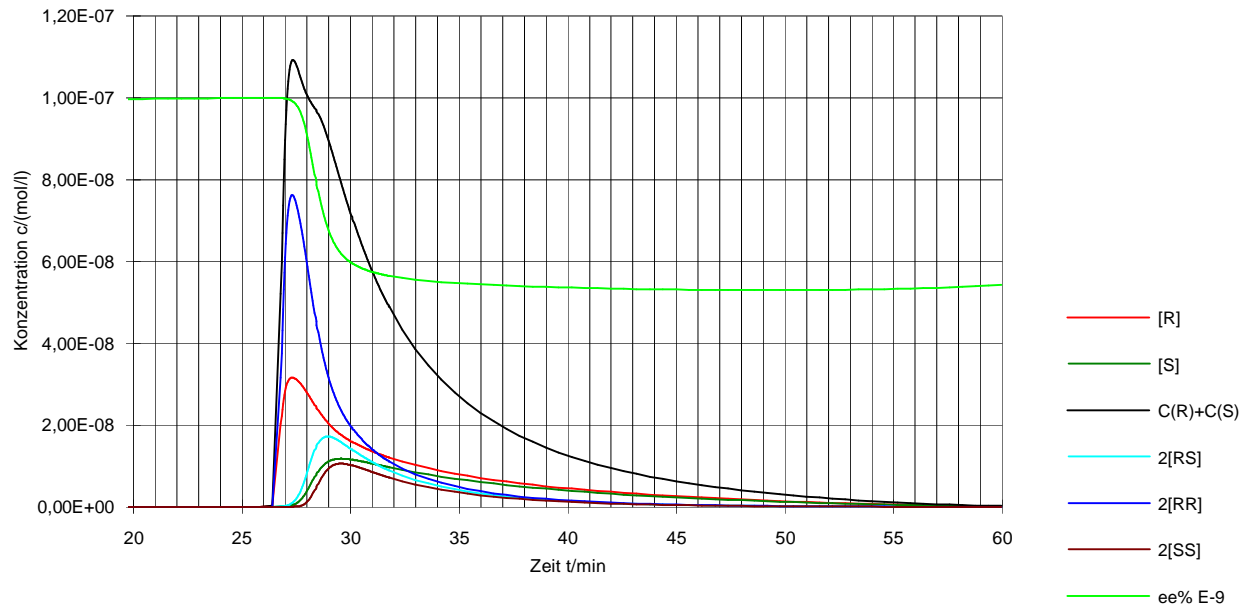


Abbildung 8 : Testsimulation 8 (verwendete Parameter siehe Tabelle 3 )

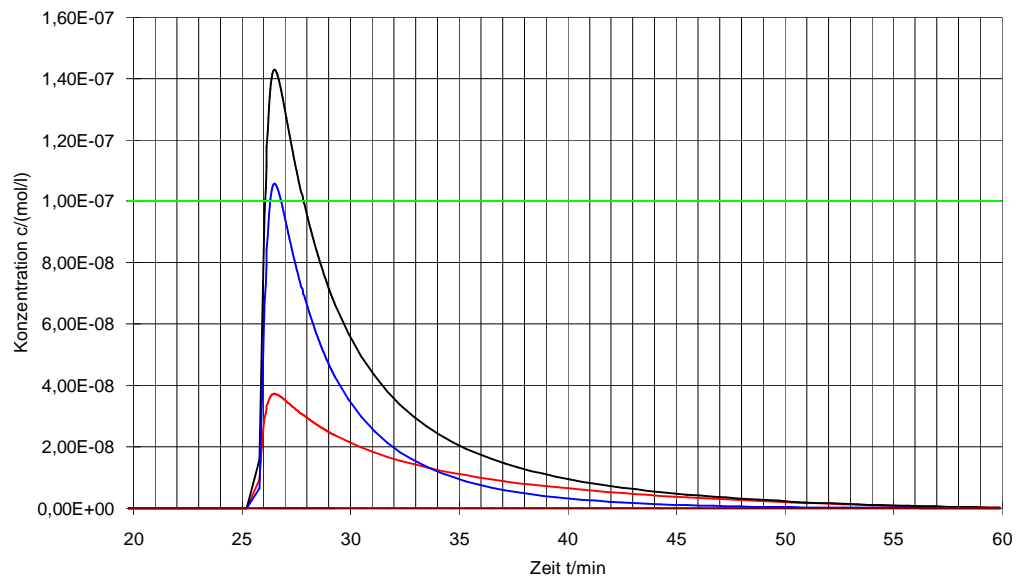
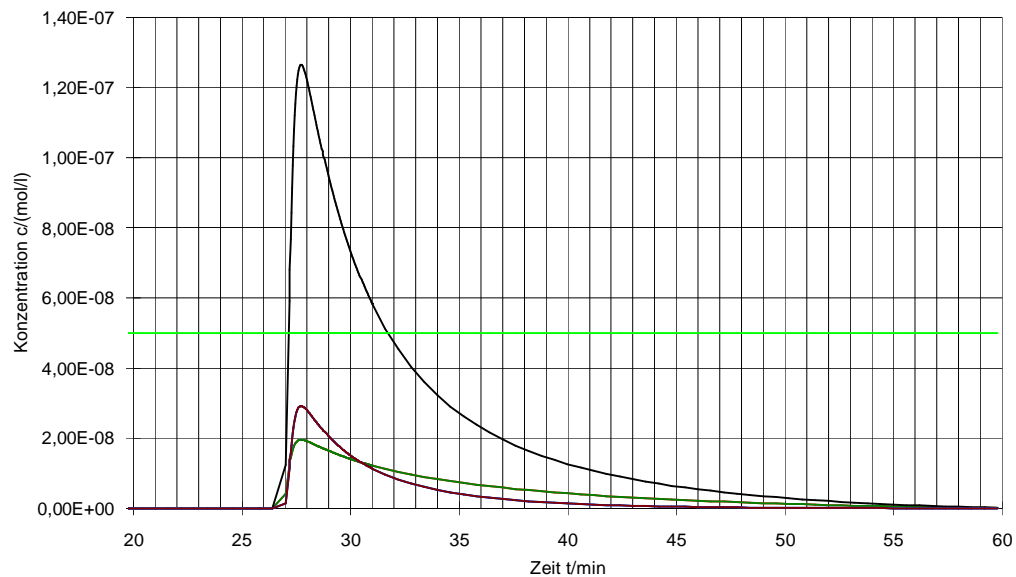


Abbildung 9 : Testsimulation 9 (verwendete Parameter siehe Tabelle 3 )



Von besonderem Interesse ist hier der Grenzfall, daß alle Gleichgewichtskonstanten bzw. Kapazitätsfaktoren der Dimere gleich sind. Abbildung 7 zeigt die Simulation dieses Chromatogramms (Parameter in Tabelle 3 enthalten). Wie man ansehen kann, kommt es zur Frontelution des reinen Überschußenantiomers, ganz im Widerspruch zum angenommenen Modellansatz. Der Racematpeak zeigt sich nur als Schulter in der Summenkurve. (Eine Peakseparierung wäre durch Steigerung der Dimerbildung, so daß die Enantiomerenüberschußkurven steiler werden, erreichbar.) Zur Klärung dieses Ergebnisses muß man sich die Chromatogramme des reinen Enantiomers (Abbildung 8) und des Racemates (Abbildung 9) ansehen. Die Retentionszeiten in diesen beiden Simulationen sind nicht gleich, 26.49 min für die Simulation des reinen Enantiomers, 27.72 min für die des Racemates. Im Racematchromatogramm sind die Kurven der Konzentrationen 2[RR], 2[SS] und 2[RS] gleich und liegen übereinander, ebenso die Monomerkurven für das R- und S-Enantiomer. Wie man den Monomerkurven in den beiden Simulationen 8 und 9 entnehmen kann, ist der Monomeranteil an der Summenkurve im Racematchromatogramm bedeutend höher. Da gleiche Parametersätze und Aufgabemengen verwendet wurden, muß dies modellbedingte Gründe haben.

Leitet man die Gleichgewichtsgleichung für einen theoretischen Boden her, so vereinfacht sich für den Fall des reinen Enantiomers die Gleichung (37) unter Verwendung der Substitutionen (39)-(41) zu :

$$2 a [R]^2 + c [R] = C(R) \quad (46)$$

Der Racematsimulation liegt dagegen für einen theoretischen Boden folgendes Gleichungssystem zu Grunde :

$$2 a [R]^2 + b [R][S] + c [R] = C(R) \quad (47)$$

$$2 a [S]^2 + b [R][S] + c [S] = C(S) \quad (48)$$

Da ein Racemat vorliegt, muß gelten

$$C(R) = C(S). \quad (49)$$

Das Gleichungssystem (47), (48) kann nur dann erfüllt werden, wenn

$$[R]=[S]. \quad (50)$$

Unter der Annahme, daß die Dimerkonstanten gleich sind, folgt

$$a = b, \quad (51)$$

und somit

$$6 a [R]^2 + 2 c [R] = C(R) + C(S) \quad (52)$$

Dies bedeutet aber, daß bei gleicher Substanzmenge im Falle der Racemataufgabe in einem theoretischen Boden prinzipiell weniger Dimere vorhanden sind. Ein einfaches Rechenbeispiel illustriert diesen Befund.

$$a = b = 10$$

$$c=1$$

( Nur jeweils eine Lösung der zu verwendenden quadratischen Gleichungen ist chemisch sinnvoll. )

Abbildung 10 : Testsimulation 10 (verwendete Parameter siehe Tabelle 4 )

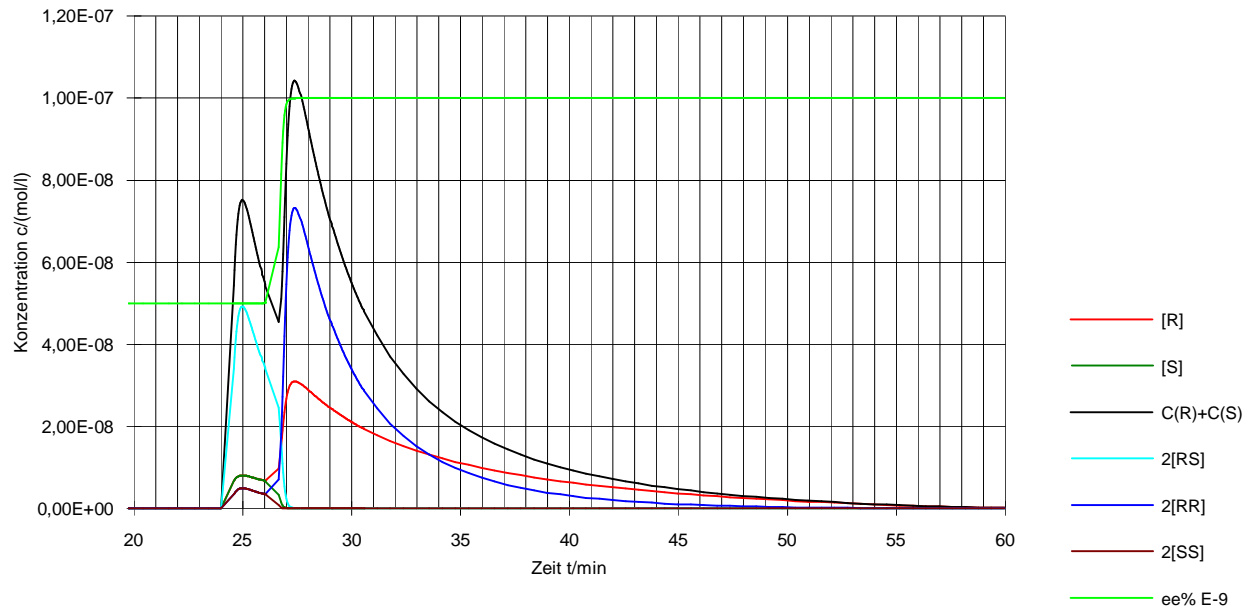


Abbildung 11 : Testsimulation 11 (verwendete Parameter siehe Tabelle 4 )

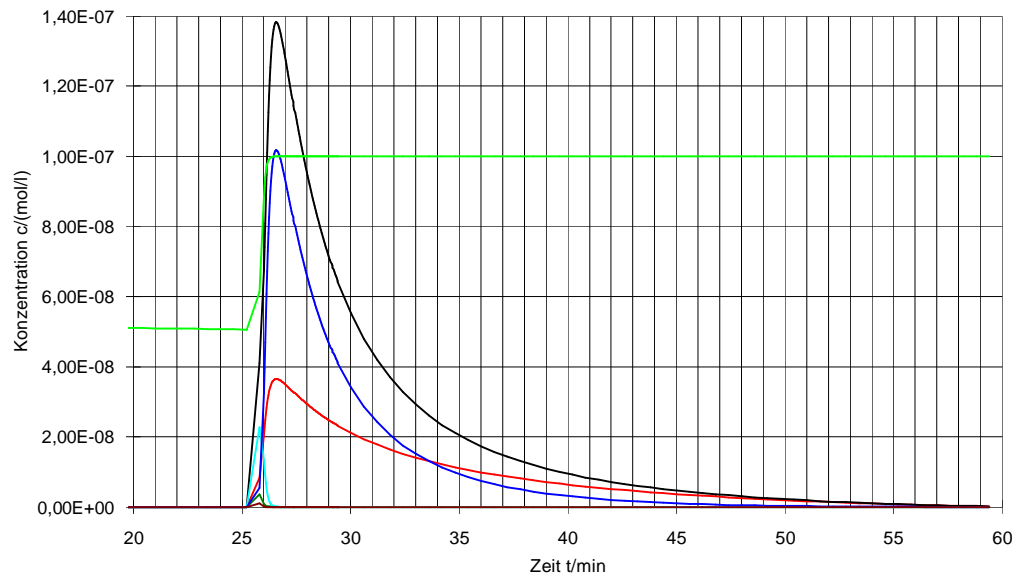
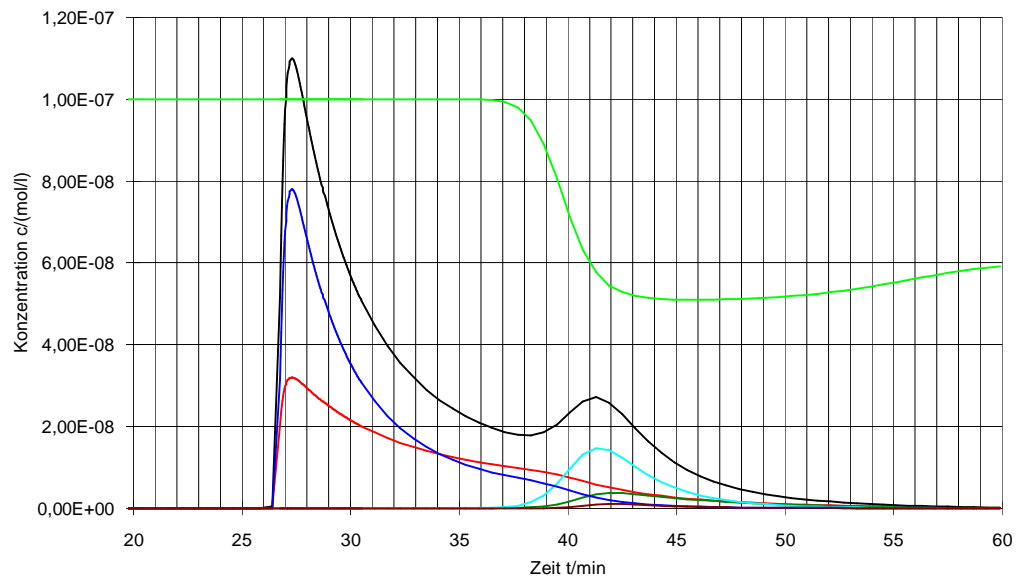


Abbildung 12 : Testsimulation 12 (verwendete Parameter siehe Tabelle 4 )



Reines Enantiomer:

$$C_R(R) = 1 \text{ mol}$$

$$[R]_R = \frac{-c + \sqrt{c^2 + 4 \cdot 2aC_R(R)}}{2 \cdot 2a}$$

$$[R] = 0.2000 \text{ mol}$$

$$[RR] = 0.4000 \text{ mol}$$

Racemat:

$$C_{RS}(R) = C_{RS}(S) = 0,5 \text{ mol}$$

$$[R]_{RS} = \frac{-c + \sqrt{c^2 + 4 \cdot 3aC_{RS}(R)}}{2 \cdot 3a}$$

$$[R] = 0.1135 \text{ mol} \quad [S] = 0.1135 \text{ mol}$$

$$[RR] = 0.1288 \text{ mol} \quad [SS] = 0.1288 \text{ mol} \quad [RS] = 0.1288 \text{ mol}$$

In diesem Beispiel liegen somit 3.49 % mehr Dimere im Falle des reinen Enantiomers vor.

Wie man leicht mit Hilfe der Beziehungen (46) bis (48) erkennen kann, sind für beide Systeme nur dann gleiche Dimerisierungsgrade und damit auch identische Chromatogramme zu erwarten ( bei  $k_{(RS)} = k_{(RR)}$  ), falls gilt :

$$2a = b \quad (53)$$

Dies wird auch durch hier nicht weiter angeführte Simulationen bestätigt. In freien Energien ausgedrückt, muß die Bildung heterochirale Assoziate bei Zimmertemperatur um 0,41 kcal/mol günstiger sein als die der homochiralen Komplexe.

$$\Delta G_{(RS)} = \Delta G_{(RR)} - RT \ln 2 \quad (54)$$

Fordert man als Bedingung für eine Frontelution eines Enantiomerengemisches einen höheren heterochiralen Dimerisierungsgrad, so folgt, unter Rücksubstitution mit den Gleichungen (39)-(41), die Bedingung :

$$2 K_{m(RR)} (1 + k_{(RR)}) < K_{m(RS)} (1 + k_{(RS)}) \quad (55)$$

Wie man leicht einsehen kann, ist dies nur durch eine Steigerung von  $K_{m(RS)}$  möglich. Eine Erhöhung des Kapazitätsfaktor  $k_{(RS)}$  bedingt größere Retentionszeiten  $R_{t(RS)}$  und fördert nur die Frontelution des reinen Überschußenantiomers.

Tabelle 4 : Parameter zu den Testsimulationen 10-12

Test-simulation	$R_{t(RS)}$ /min	$R_{t(RR)}$ /min	$R_{t(R)}$ /min	$K_{m(RR)}$ /(l/mol)	$K_{m(RS)}$ /(l/mol)	Maximum 1 /min	Maximum 2 /min	$\alpha$
10	20.3	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^6$	25	27.39	1.11
11	23.3	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^6$	25.5	26.5	1.04
12	57.0	20.3	57.0	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^6$	27.29	41.3	1.58

Sonstige Parameter:

Böden : 500 ;  $t_0$  : 3min ;  $\beta$  : 1, V : 3.14 ml

Simulation 10,12: Aufgabemenge  $n_R$  :  $4.68 \cdot 10^{-7}$  mol  $n_S$  :  $2.31 \cdot 10^{-7}$  mol

Simulation 11 Aufgabemenge  $n_R$  :  $6.29 \cdot 10^{-7}$  mol  $n_S$  :  $6.99 \cdot 10^{-8}$  mol

Unter der Bedingung  $2a=b$ ,  $k_{(RR)}=k_{(RS)}$  ergaben Simulationen mit unterschiedlichsten Enantiomerenverhältnissen keine Überschußabtrennung. Die Retentionszeit blieb wie bei dem Chromatogramm des reinen Enantiomers sowie des Racemats bei 26.49 min. Steigert man dagegen, bei gleichen Kapazitätsfaktoren für die Dimere, b über 2a hinaus, so kommt es zur

Abbildung 13 : Testsimulation 13 (verwendete Parameter siehe Tabelle 5 )

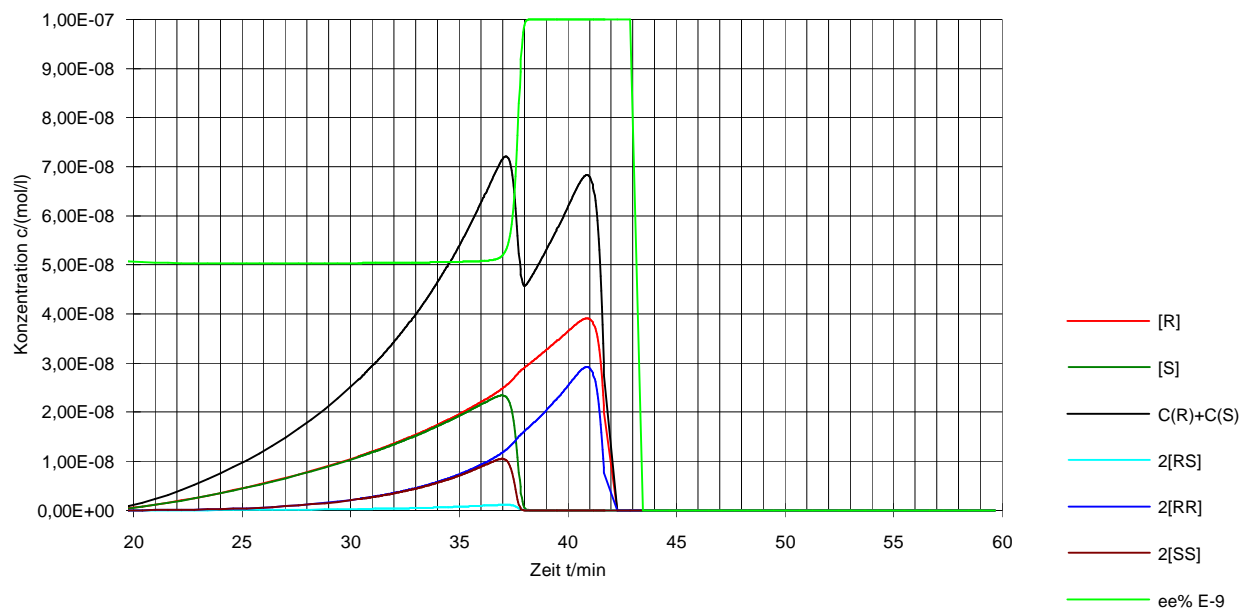


Abbildung 14 : Testsimulation 14 (verwendete Parameter siehe Tabelle 5 )

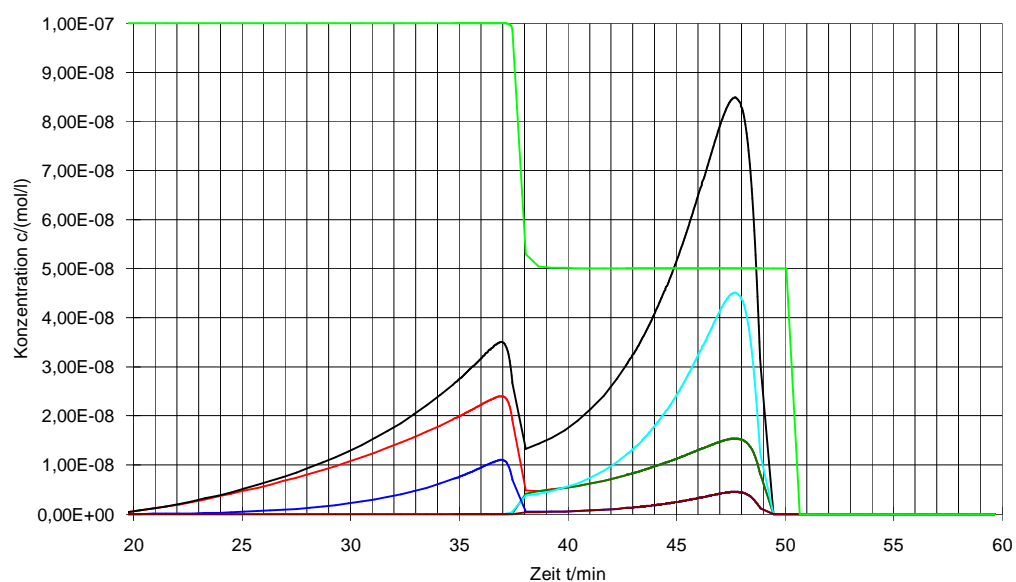
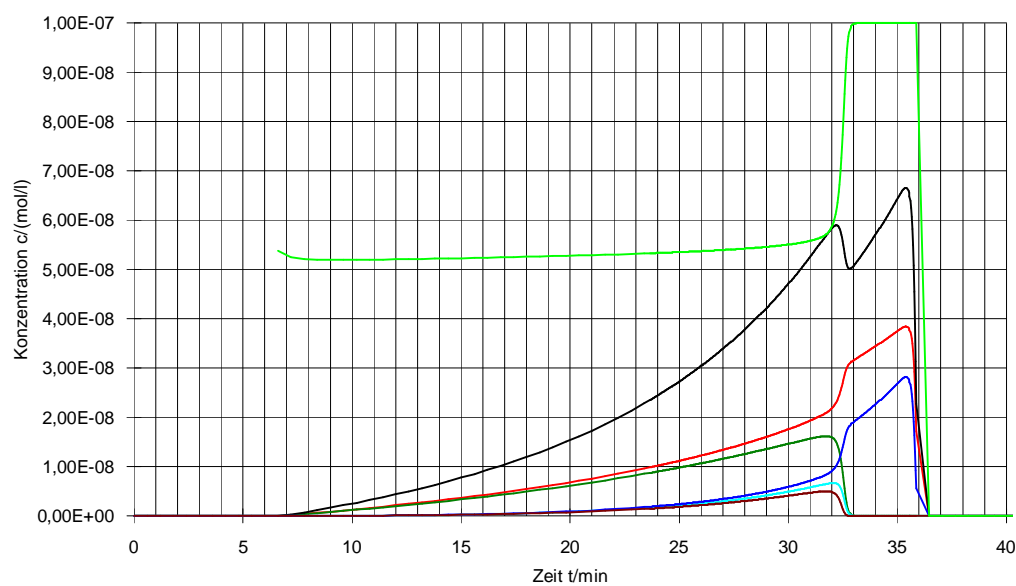


Abbildung 15 : Testsimulation 15 (verwendete Parameter siehe Tabelle 5 )



Fronteluation eines Enantiomerengemisches. Wie aus den Abbildungen (10)-(11) (Tabelle 4) zu ersehen ist, handelt es sich hier um ein Racemat. Abbildung 10 zeigt eine typische Fronteluerung des Racemates. Erniedrigt man das eingesetzte Enantiomerenverhältnis, Abbildung (11), so bleibt es, wie aus den Rechnungen zur Bedingung  $2a=b$  zu erwarten ist, bei diesem Trennungsverhalten. Dagegen führt eine Erhöhung der Retentionszeit der heterochiralen Dimere,  $k_{(RS)}$ , zur Fronteluerung des reinen Überschußenantiomers, siehe Simulation (12). Das gausskurvenartige Aussehen der Racematkurve in diesem Chromatogramm ist für diesen Parametersatz charakteristisch. Tabelle 4 gibt die verwendeten Parametersätze wieder.

Die zuvor erläuterten Chromatogramme zur sukzessiven Erniedrigung von  $R_{t(RR)}$ , (Simulation 1, 4-6), zeigen einerseits, daß bei  $2K_{m(RR)} > K_{m(RS)}$  immer eine Fronteluerung des reinen Überschußenantiomers zu beobachten ist. Andererseits ist die Umkehrung der Bedingung nicht hinreichend für eine Fronteluation des Racemats, wie Simulation 12 beweist. Verständlich wird nun auch die Sonderstellung der Racematfronteluerung, die bis jetzt nur einmal experimentell beobachtet wurde [7]. Für sie gelten wesentlich eingeschränkere Bedingungen.

Desweiteren sind Überschußabtrennungen theoretisch auch dann möglich, falls die Retentionszeit der Dimere größer als die der Monomere wird. Die prinzipielle Form der Chromatogramme wechselt vom Tailing zum Fronting. Bei entsprechender Parameterwahl ist eine Fronteluation des Überschußenantiomers, Abbildung (14), oder aber auch der Racematfraktion, Abbildung (13), zu erreichen. Die den Simulationen zu Grunde liegenden Parameter sind in Tabelle 5 zu finden.

Eine ausschließliche Dimerisierung in der stationären Phase bei einer Enantiomerenüberschußabtrennung, wie sie von Gil-Av et.al [7] bei einigen chromatographischen Trennungen postuliert wurde, unterliegt gewissen Bedingungen, die sich aus dem Prinzip der Mikroreversibilität ergeben. Entsprechend den Gleichungen (33)-(34) gilt:

$$\frac{K_{m(RR)}}{K_{S(RR)}} = \frac{k_{(R)}^2}{k_{(RR)}}; \frac{K_{m(RS)}}{K_{S(RS)}} = \frac{k_{(R)}^2}{k_{(RS)}} \quad (56;57)$$

Die bevorzugte Selbstassoziation in der stationären Phase fordert, daß  $K_{S(RR)} > K_{m(RR)}$  bzw.  $K_{S(RS)} > K_{m(RS)}$ , und damit auch, daß

$$1 > \frac{k_{(R)}^2}{k_{(RR)}}, 1 > \frac{k_{(R)}^2}{k_{(RS)}} \quad (58)$$

erfüllt wird.

Das Trennverhalten sollte in diesen Fällen durch das in den Abbildungen (13) und (14) gezeigte charakteristische Fronting geprägt sein. Abbildung 16 zeigt ein Chromatogramm das den vorgegebenen Bedingungen für eine fast ausschließliche Dimerisierung in der stationären Phase genügt. Im Vergleich ist das in Abbildung 15 wiedergegebene Chromatogramm noch weit von dieser Bedingung entfernt. Jedoch zeigt es schon alle wesentlichen Merkmale der Simulation 16. Die aus den Parametern resultierenden Gleichgewichtskonstanten betragen :



Simulation 15                       $K_{m(RR)} = K_{m(RS)} = 10^4 \text{ l/mol}$                        $K_{s(RR)} = K_{s(RS)} = 1,01 \cdot 10^5 \text{ l/mol}$   
Simulation 16                       $K_{m(RR)} = K_{m(RS)} = 10 \text{ l/mol}$                        $K_{s(RR)} = K_{s(RS)} = 1,87 \cdot 10^4 \text{ l/mol}$ .

Trennungen gemäß dem von Gil-Av postulierten Mechanismus der chiralen Vorbelegung sollten also ein sehr charakteristisches Aussehen aufweisen. Derartig aussehende Chromatogramme sind in unserem Arbeitskreis noch nie experimentell beobachtet worden.

Tabelle 5 : Parameter zu den Testsimulationen 13-16

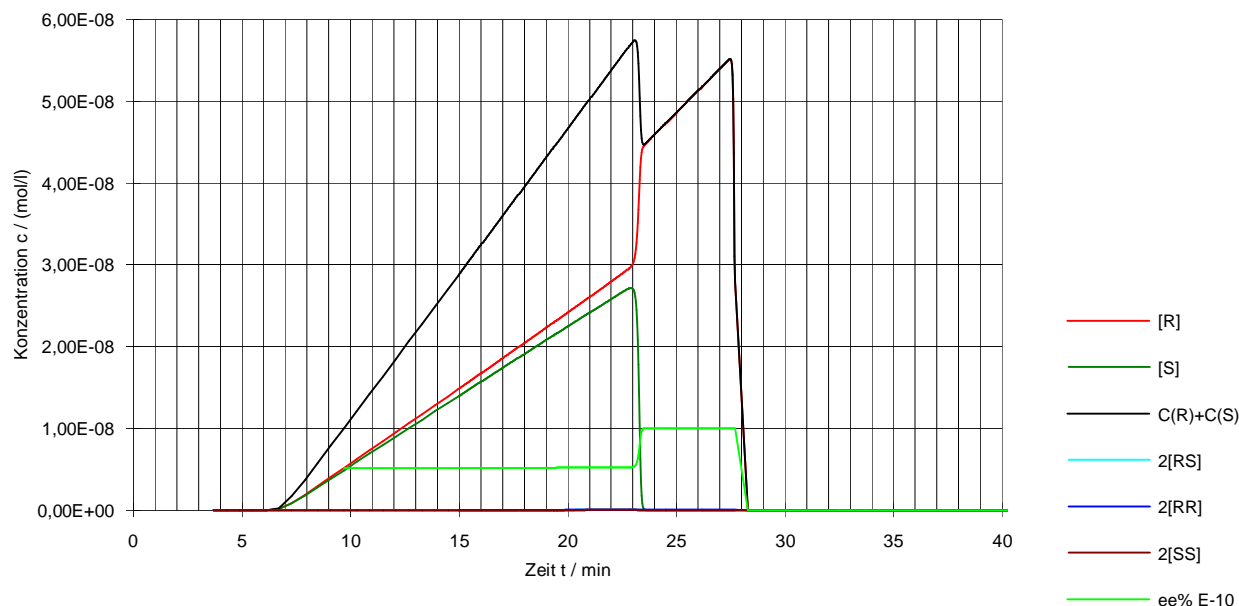
Test-simulation	$R_{t(RS)}$ /min	$R_{t(RR)}$ /min	$R_{t(R)}$ /min	$K_{m(RR)}$ /(l/mol)	$K_{m(RS)}$ /(l/mol)	Maximum 1 /min	Maximum 2 /min	$\alpha$
13	57.0	57.0	23.3	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^3$	37.16	40.9	1.11
14	57.0	57.0	23.3	$4 \cdot 10^4$	$4 \cdot 10^5$	36.9	47.71	1.32
15	57.0	57.0	7.0	$1 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^4$	32.2	35.4	1.11
16	$1 \cdot 10^4$	$1 \cdot 10^4$	7.0	10	10	23.09	27.5	1.22

Sonstige Parameter:

Böden : 500 ;  $t_0$  : 3min ;  $\beta$  : 1,  $V$  : 3.14 ml

Simulation 13-16: Aufgabemenge  $n_R$  :  $4.68 \cdot 10^{-7} \text{ mol}$      $n_S$  :  $2.31 \cdot 10^{-7} \text{ mol}$

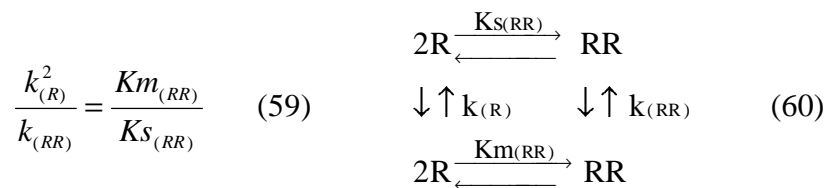
Abbildung 16 : Testsimulation 16 (verwendete Parameter siehe Tabelle 5 )



In diesem Abschnitt wurde gezeigt, daß im Rahmen der Enantiomerenüberschußabtrennung dem Auftreten der Fronteluierung des Enantiomerenüberschusses oder der racemischen Fraktion sowie den Chromatogrammformen Fronting oder Tailing durch die Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren eindeutige, hier hergeleitete Bedingungen auferlegt sind.

### 2.5.2. Chromatogrammformen der reinen Enantiomeraufgabe

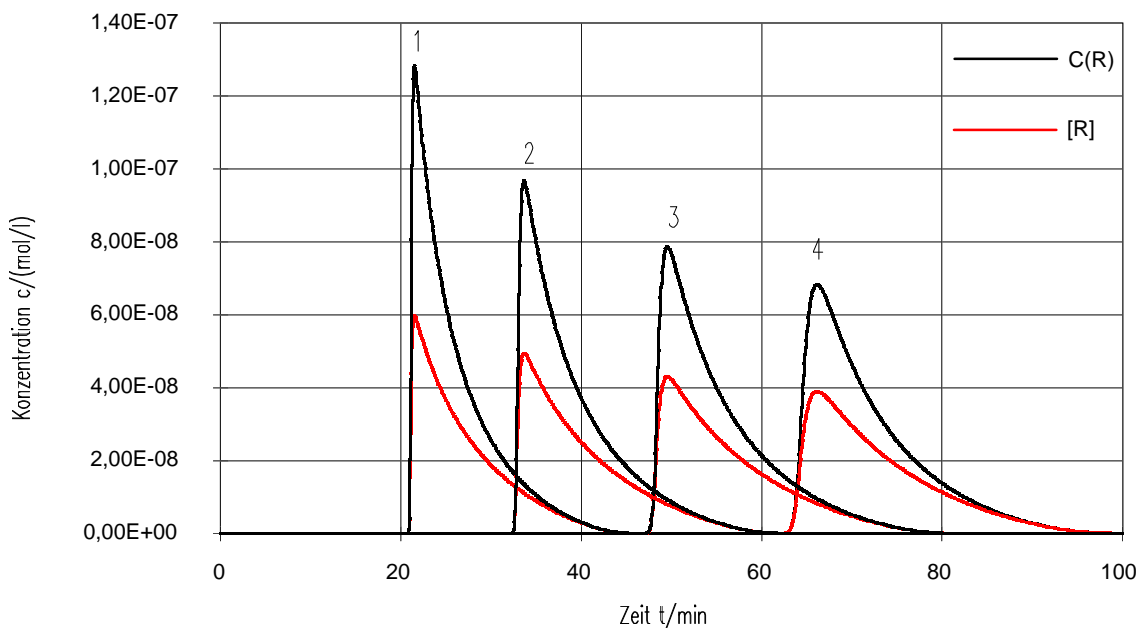
Die Größenänderung von  $Km_{(x)}$ ,  $Ks_{(x)}$  sowie andere Feinheiten der Parameterwahl bei der Simulationen von Chromatogrammen werden der Einfachheit und Überschaubarkeit halber erst am Beispiel des Retentionsverhaltens des reinen Enantiomers diskutiert. Die bereits gezeigten Simulationen haben schon auf den großen Einfluß der homochiralen Dimerparameter hingewiesen und rechtfertigen daher diese Vorgehensweise. Zunächst soll noch einmal das Prinzip der Mikroreversibilität herangezogen werden, das entsprechend den Gleichungen (33) und (22)-(25) hier lautet:



Somit ist lediglich die Vorgabe von drei Konstanten notwendig, da die vierte durch Gleichung (59) bestimmt ist.

Hält man das Verhältnis  $\frac{Km_{(RR)}}{Ks_{(RR)}}$  konstant und variiert  $\frac{k_{(R)}^2}{k_{(RR)}}$ , so führt dies bei kleinen  $k_{(RR)}$  zu einem scharfen, schwänzenden Peak, der bei fortlaufender Steigerung von  $k_{(RR)}$  'zerläuft'. Abbildung 17 veranschaulicht dies. Die entsprechenden Parameter findet man in Tabelle 6.

Abbildung 17 : Vergleich von Chromatogrammen reiner Enantiomere bei konstantem  $\frac{Km_{(RR)}}{Ks_{(RR)}}$



Die hier zugrunde gelegten Bedingungen stellen in der praktischen Anwendung den Wechsel zu einer anderen Fließmittelmischung dar. Im Idealfall sollten die Gleichgewichtskonstanten

$Km_{(RR)}$  und  $Km_{(RS)}$  lösungsmittelunabhängig sein. Experimentell beobachtete man aber ein ähnliches Verhalten [4] wie bei der Variation der Fließmittelzusammensetzung. In den angeführten Beispielen (Abbildung 17) ändert sich die Retentionszeit sehr stark. Simulationen mit konstanter Retentionszeit sind nur dann möglich, wenn ein weiterer Parameter vorgewählt wird. Damit ist aber die Konstanz des Verhältnisses  $\frac{Km_{(RR)}}{Ks_{(RR)}}$  nicht mehr gewährleistet.

Empirisch wurde ein weitgehend lineares Verhalten der Retentionszeit  $Rt_{(RR)}$  gegenüber der Retentionszeit des Peakmaximums  $Rt_{max}$  bei sonst gleichbleibenden Parametern ( $Ks_{(RR)}$ ,  $Km_{(RR)}$ ,  $k_{(R)}$ ,  $t_0$ ,  $\beta$ , Bodenzahl) festgestellt.

$$\frac{Rt_{max}^{(1)} - Rt_{max}^{(2)}}{k_{(RR)}^{(1)} - k_{(RR)}^{(2)}} = \text{konstant für } (2t_0 < Rt_{(RR)} < \infty) \quad (61)$$

Hiermit ist es möglich, das Retentionsverhalten bei vorgegebener Retentionszeit zu simulieren. Diese Beziehung erwies sich als sehr nützlich bei der Simulation von experimentellen Chromatogrammen. Eine analoge Beziehung gilt auch für den Kapazitätsfaktor  $k_{(R)}$ .

$$\frac{Rt_{max}^{(1)} - Rt_{max}^{(2)}}{k_{(R)}^{(1)} - k_{(R)}^{(2)}} = \text{konstant für } (2t_0 < Rt_{(R)} < \infty) \quad (62)$$

Sie ist aber praktisch von geringerer Bedeutung, da  $k_{(R)}$  als einzige Größe relativ einfach aus den experimentellen Chromatogrammen bestimmt werden kann.

Tabelle 6 : Parameter zu den Testsimulationen 17-32

Simulation	Abbildung	$Rt_{(RR)}$ /min	$Rt_{(R)}$ /min	$Km_{(RR)}$ /(l/mol)	$Rt_{max}$ /min
17.1	17	12.0	41.95	$10^4$	21.51
17.2	17	20.3	57.0	$10^4$	34.82
17.3	17	33.0	74.2	$10^4$	49.54
17.4	17	48.0	90.1	$10^4$	66.15
18.1	18	31.77	41.95	$10^4$	34.82
18.2	19	22.33	57.0	$10^4$	34.82
18.3	20	3.03	74.11	$10^4$	34.82
19.1	21	20.3	57.0	10	56.72
19.2	22	20.3	57.0	$10^3$	48.09
19.3	23	20.3	57.0	$10^4$	33.64
19.4	24	20.3	57.0	$10^5$	23.83
19.5	25	20.3	57.0	$10^6$	21.22
19.6	26	20.3	57.0	$10^7$	20.55
	27-32	$20.3 = Rt_{(RS)}$	57.0	siehe Text	siehe Text

Sonstige Parameter:

Böden : 500  $t_0$  : 3min  $\beta$  : 1 V : 3.14 ml

Simulation 17.1-19.6 : Aufgabemenge  $n_R$  :  $6.99 \cdot 10^{-7}$  mol

Abbildung 27-32 : Aufgabemenge  $n_R + n_S$  :  $6.99 \cdot 10^{-7}$  mol

Beim Wechsel zu einer anderen Säule mit gleicher Füllung, wobei alle sonstigen experimentellen Bedingungen unverändert bleiben, muß lediglich  $K_{m(RR)}$  konstant gehalten werden. Auch hier können Beziehung (61) und (62) nutzbringend angewandt werden.

Die Simulationen 1, 3 und 4 aus Abbildung 17 wurden mit Hilfe von Gleichung (61) zu gleichen Retentionszeiten umgerechnet und sind in den Abbildungen 18-20 dargestellt (Parameter siehe Tabelle 6). Sie veranschaulichen sehr gut die Änderungen des chromatographischen Verhaltens bei frei wählbaren  $k_{(R)}$  und  $k_{(RR)}$ . Bei steigender Differenz der Retentionszeiten, ( $Rt_{(R)} - Rt_{(RR)}$ ) wird aus einem beinahe glockenkurvenartigen Peak mit nur leichtem Tailing (Abbildung 18) ein typisches Tailing-Chromatogramm, das den charakteristischen exponentialfunktionsartigen Auslauf zeigt (Abbildung 19). Eine weitere Erhöhung der Differenz führt dann zu einem fast linearen Abfall der Flanke des Chromatogramms (Abbildung 20). Zu dieser Simulation bleibt noch anzumerken, daß eine fortgesetzte Verringerung von  $k_{(RR)}$  zu keiner weiteren Veränderung des Chromatogramms führt.

Hält man dagegen das Verhältnis  $\frac{k_{(R)}^2}{k_{(RR)}}$  konstant, so wächst ab einem  $K_{m(RR)}$ -Wert über  $10^4$

l/mol unter leichter Verschiebung der Retentionszeit die Höhe des Peaks. Die entsprechenden Simulationen mit den in Tabelle 6 aufgeführten Parametern sind den Abbildungen 21-26 zu entnehmen. Die Reihe von Simulationen (Abbildungen 21-26) mit  $K_{m(RR)}$ -Werten von 10 bis  $10^7$  l/mol zeigt, daß mit steigender Dimerisierung die Tendenz zum Tailing zunimmt und ab einem  $K_{m(RR)}$ -Wert von  $10^6$  l/mol wieder zurückgeht. Die Kurvenform der Simulation 19.6 nähert sich wieder einer Glockenkurve an. Anscheinend ist das Dimerisierungsgleichgewicht so stark zu der Seite der Dimeren hin verschoben, daß die Konzentration an Monomeren vernachlässigbar wird. Ab einem  $K_{m(RR)}$ -Wert über  $10^7$  l/mol ist dann unter den gewählten Bedingungen auch bei der Simulation der Trennung einer nichtracemischen Mischung keine Separation zu erwarten.

Abbildung 18 : Testsimulation 18.1 zu konstanter Retentionszeit  $Rt_{\max}=34.82$  (Parameter siehe Tabelle 6)

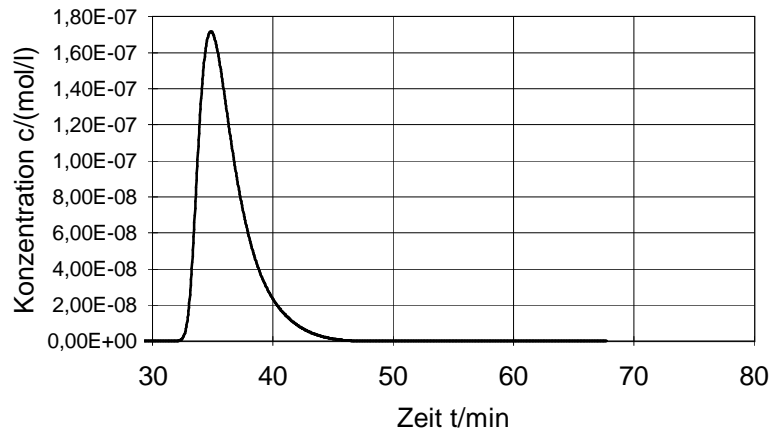


Abbildung 19 : Testsimulation 18.2 zu konstanter Retentionszeit  $Rt_{\max}=34.82$  (Parameter siehe Tabelle 6)

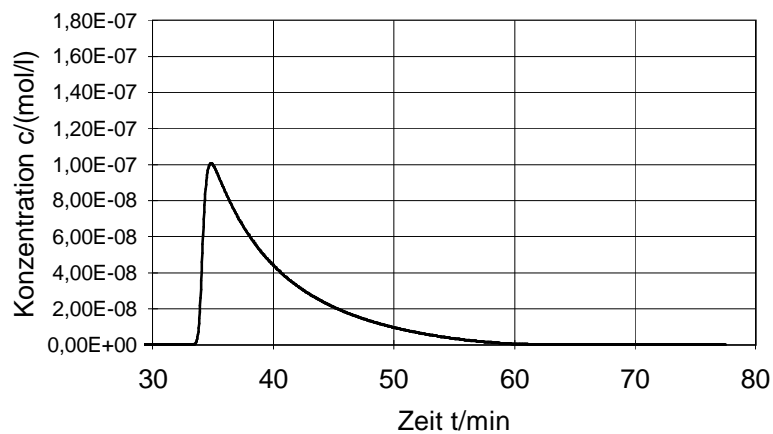


Abbildung 20 : Testsimulation 18.3 zu konstanter Retentionszeit  $Rt_{\max}=34.82$  (Parameter siehe Tabelle 6)

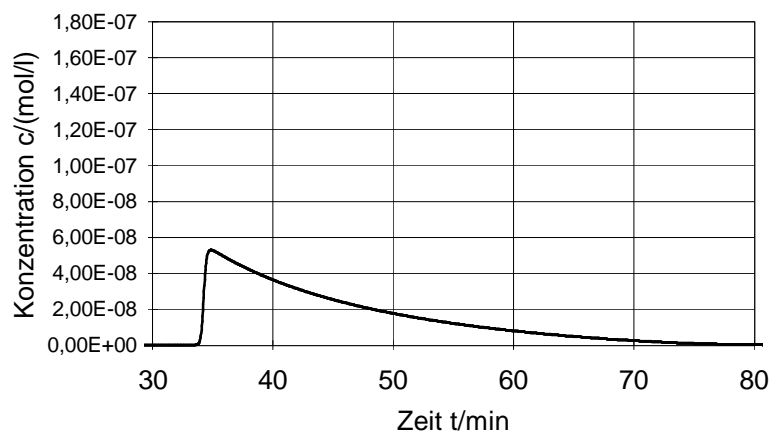


Abbildung 21-26 : Vergleich von Chromatogrammen reiner Enantiomere bei konstantem  $\frac{k_{(R)}^2}{k_{(RR)}}$   
(verwendete Parameter siehe Tabelle 6)

Abbildung	21	22	23
Simulation	19.1	19.2	19.3
$Km_{(RR)}$ :	10 l/mol	$10^3$ l/mol	$10^4$ l/mol

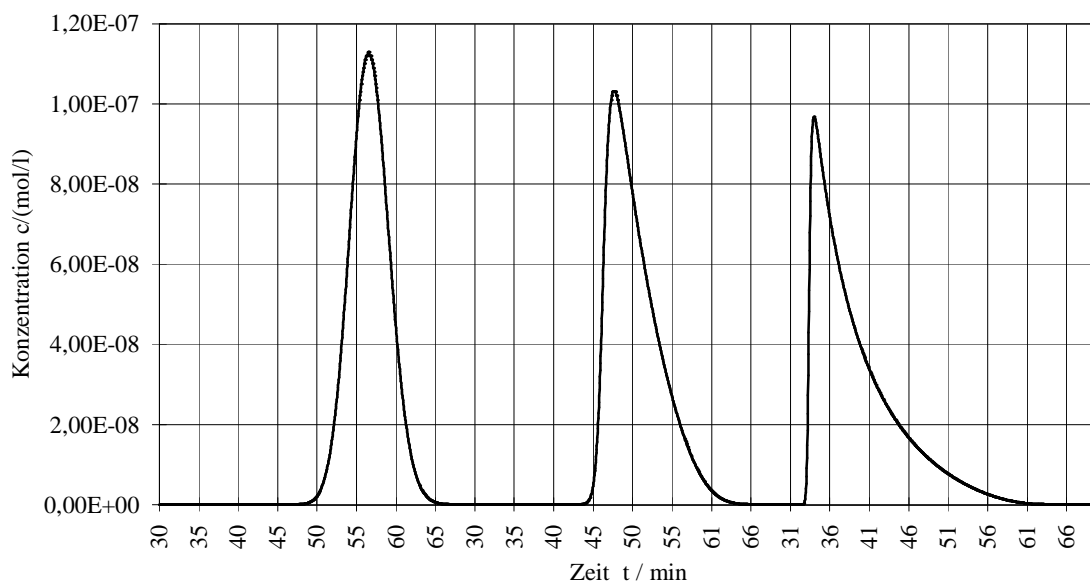
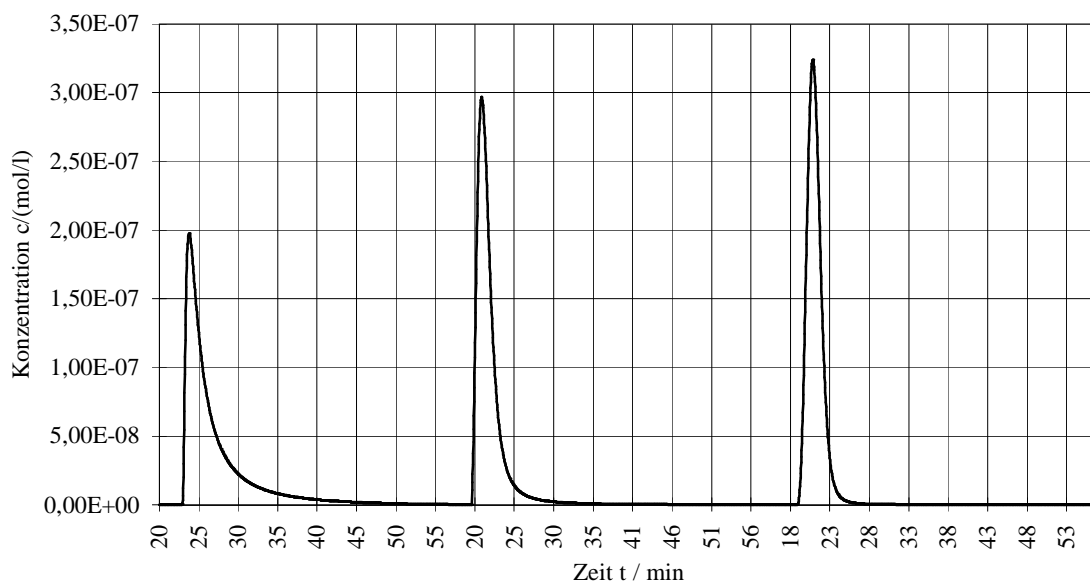


Abbildung	24	25	26
Simulation	19.4	19.5	19.6
$Km_{(RR)}$ :	$10^5$ l/mol	$10^6$ l/mol	$10^7$ l/mol



### 2.5.3. Untersuchung des Trennverhaltens in Abhängigkeit der Gleichgewichtskonstanten.

Nach dieser grundlegenden theoretischen Untersuchung des chromatographischen Verhaltens reiner Enantiomere, stellt sich nun die Frage, in welcher Form die Enantiomerenüberschußabtrennung nichtracemischer Mischungen von der Gleichgewichtskonstanten  $K_{m(RR)}$  abhängt. Hierzu wurde eine Reihe von Simulationen mit  $K_{m(RR)}$ -Werten im Bereich von 10 bis  $10^7$  l/mol bei ansonsten gleichbleibenden Bedingungen durchgeführt (Tabelle 6). Die Parameterwerte für homochirale und heterochirale Dimere sind identisch ( $K_{m(RR)}=K_{m(RS)}$ ,  $k_{(RR)}=k_{(RS)}$ ). Zuerst wurden die Chromatogramme zu einer reinen Enantiomeraufgabe von  $4.194 \cdot 10^{-7}$  mol berechnet, anschließend für eine Racemataufgabe von  $2.796 \cdot 10^{-7}$  mol. Die eingesetzten Mengen an Racemat und reinem Enantiomer entsprechen einer hypothetischen Probenaufgabe von  $6.99 \cdot 10^{-7}$  mol der optischen Reinheit 60 %ee. Anschließend wurde die Trennung von  $6.99 \cdot 10^{-7}$  mol dieser 80/20 Mischung simuliert. In Abbildung 27 sind die sich aus den Retentionszeiten  $R_{t_{max}}$  der reinen Enantiomer- ( $4.194 \cdot 10^{-7}$  mol), der Racemat- sowie der Enantiomerenüberschußabtrennungsrechnungen ergebenden Maxima gegen die Änderung von  $K_{m(RR)}$  aufgetragen. Wenn in den Chromatogrammen der nichtracemischen Mischungen der Racemat-peak (Schulter) schwierig zu identifizieren war, wurde der entsprechende Wert der Racematkurve in dem Enantiomerenüberschußchromatogramm als Orientierung verwendet.

Diese 4 Graphen zeigen einen prinzipiell eigenständigen Verlauf. Eine Approximation der Vorgänge bei der Enantiomerenüberschußabtrennung durch die Chromatogramme der reinen Enantiomeraufgabe und der Racemataufgabe ist nicht möglich. Nur in einem 'Fenster' von  $10^4$  bis  $10^6$  l/mol ist bei identischen Gleichgewichtsparametern der homochiralen und der heterochiralen Assoziate eine Trennung möglich. Im Bereich kleiner  $K_{m(RR)}$ -Werte ( $< 100$  l/mol) kann die Auftrennung auch nicht durch einen niedrigeren Dimerisierungsgrad der heterochiralen Komplexe herbeigeführt werden. Bei höheren  $K_{m(RR)}$  wird die Trennung durch den allgemein hohen Dimerisierungsgrad erschwert. Eine Erniedrigung von  $K_{m(RS)}$  würde hier auch nicht entscheidend zur Verbesserung des Trennverhaltens beitragen, da durch die immer noch hohen  $K_{m(RR)}$ -Werte auch das homochirale Unterschlußdimer zur Dimerisierung gezwungen würde. Bedingt durch die höhere Dimerenanzahl liegen deshalb die Retentionszeiten  $R_{t_{max}}$  des Enantiomerenüberschußpeaks deutlich niedriger als die der reinen Enantiomersimulationen, wie es auch aus Abbildung 27 ersichtlich ist.

Zur Veranschaulichung des Effektes wird in Abbildung 28 die Differenz der Retentionszeiten zwischen den Peaks der reinen Enantiomeraufgabe und den Überschlußpeaks der nicht-racemischen Mischungen gegen die  $K_{m(RR)}$ -Werte aufgetragen.

Auch die Retentionszeiten der Racematpeaks der Enantiomerenüberschußabtrennung und des Racematchromatogramms zeigen große Abweichungen. Da das Durchsetzen des Racematpeaks in der Summenkurve des Enantiomerenüberschußchromatogramms, wie schon vorher erläutert, von dem Verlauf der Überschußenantiomerkurve ( $2[RR]+[R]$ ) abhängt, treten die

Abbildung 27 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die Änderung der Gleichgewichtskonstanten  $K_{m(RR)}$  für die Aufgabe verschiedener Mengen des reinen Enantiomers, eines Racemates und einer nichtracemischen Mischung gleichwertiger optischer Reinheit (Parameter siehe Tabelle 6)

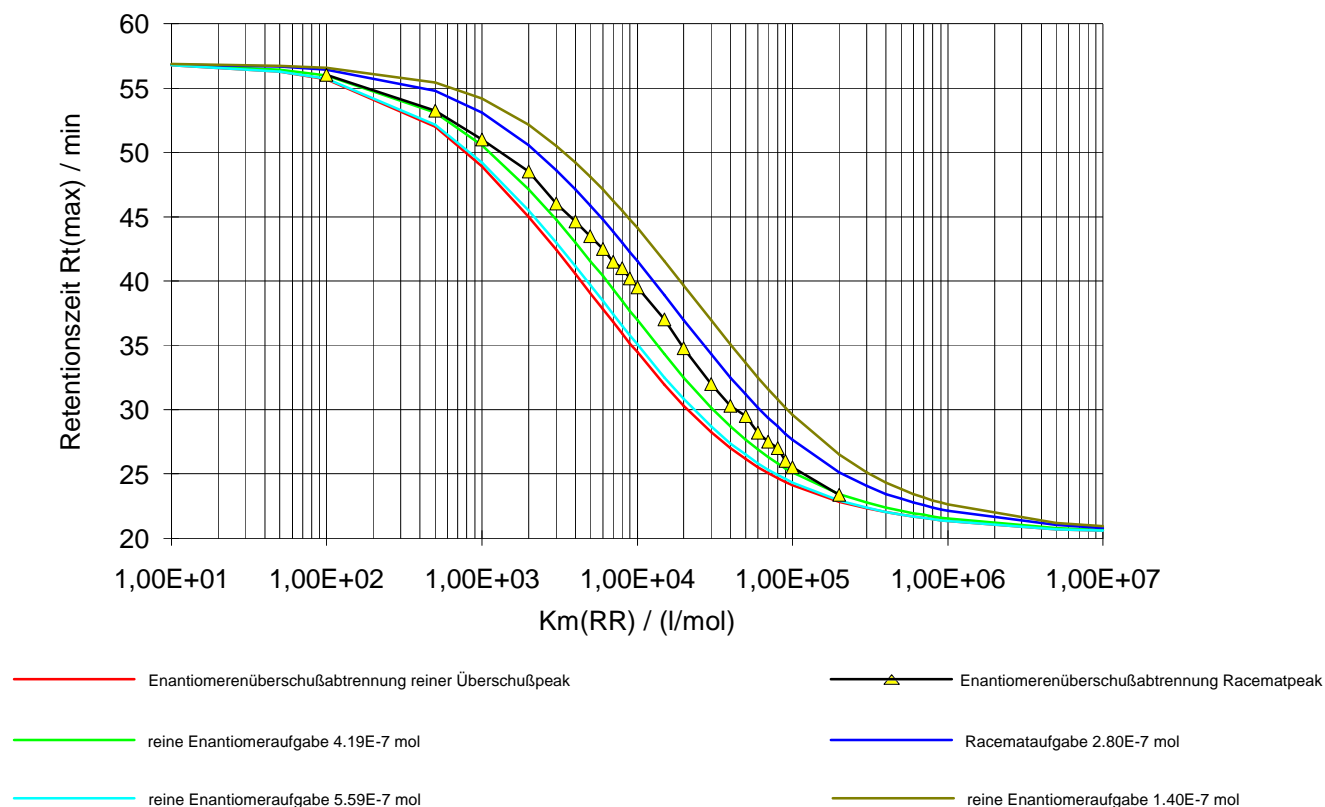
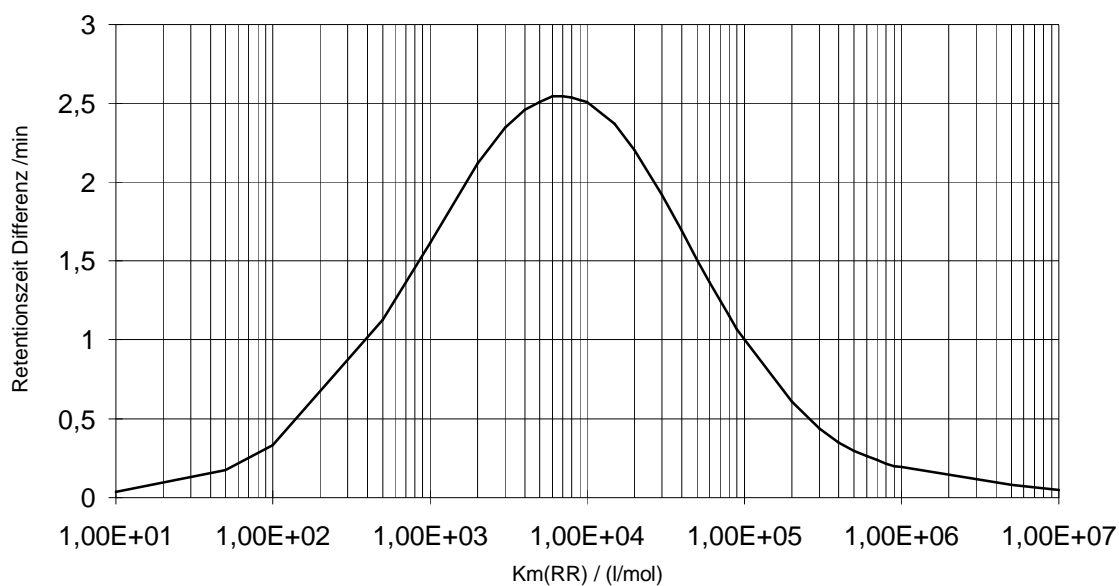


Abbildung 28 : Auftragung der Retentionszeitendifferenzen der Peaks der reinen Enantiomeraufgabe ( $4.194 \cdot 10^{-7}$  mol) und der Überschußpeaks der nichtracemischen Mischungen gegen die  $K_{m(RR)}$ -Werte entsprechend Abbildung 27



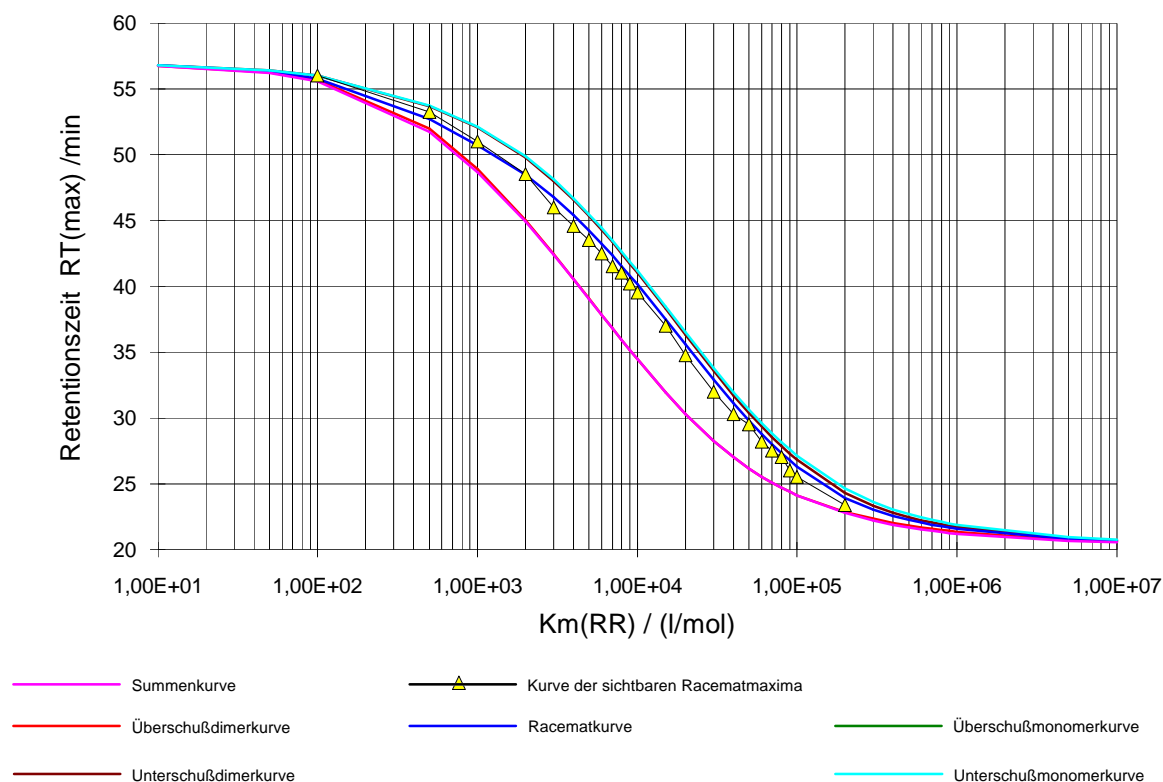


starken Abweichungen von dem Graphen für die Racemataufgaben im Bereich mittlerer  $K_{m(RR)}$ -Werte auf.

Falls man versucht, Kurganov [13] folgend, die Vorgänge bei der Enantiomerenüberschußabtrennung unter Vernachlässigung der Bildung heterochiraler Dimere zu erfassen, so ist in Abbildung 27 der Graph für die reine Enantiomerenaufgabe von  $5.59 \cdot 10^{-7}$  mol mit der Kurve für die Enantiomerenüberschußpeaks sowie der Graph für die reine Enantiomerenaufgabe von  $1.40 \cdot 10^{-7}$  mol mit der Kurve für die Racematpeaks zu vergleichen. Im Rahmen dieses Ansatzes wird die Trennung lediglich auf unterschiedliche Aufgabemengen der Enantiomere R und S zurückgeführt. Nur der Kurvenverlauf der Retentionszeiten für die Enantiomerenüberschußpeaks kann auf diese Weise sinnvoll genähert werden. Die Approximation der Retentionszeiten der entsprechenden Racematpeaks ist aber leider von so schlechter Qualität, daß dieses Modell nicht sehr realistisch erscheint.

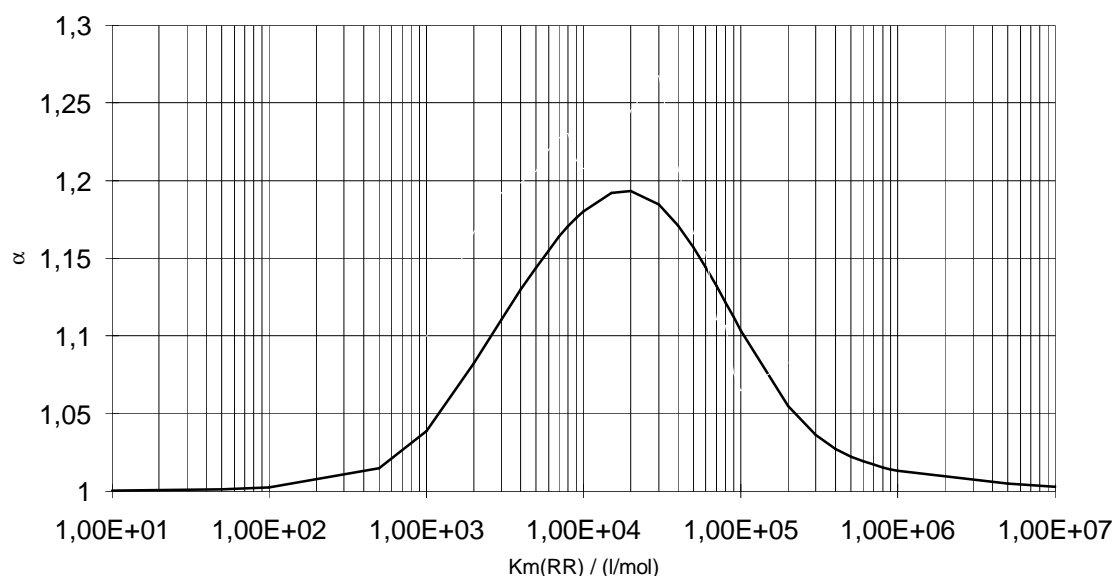
Abbildung 29 gibt Einblick in die internen Retentionszeitänderungen der Simulationen nicht-racemischer Mischungen. Man kann 3 Kurvengruppen erkennen. Die Graphen zu den Retentionszeitmaxima der Überschußmonomere, Überschußdimere und der Summenkurve liegen, kaum unterscheidbar übereinander, bei den niedrigeren Retentionszeiten. Dagegen weist die Gruppe der entsprechenden Unterschüßenantiomerkurven, die untereinander keine großen Abweichungen zeigen, über einen großen Bereich wesentlich höhere Retentionszeiten auf. Zwi-

Abbildung 29 : Auftragung der Retentionszeitmaxima  $R_{t(RR)}$ ,  $R_{t(SS)}$ ,  $R_{t(RS)}$ ,  $R_{t(R)}$  und  $R_{t(S)}$  gegen Gleichgewichtskonstanten  $K_{m(RR)}$  für eine nichtracemische Mischung der optischen Reinheit 60 %ee (Parameter siehe Tabelle 6)



schen diesen beiden Gruppen verläuft der Graph für die Racematkurvenmaxima. Er gleicht sich bei höheren  $Km_{(RR)}$ -Werten immer mehr dem der Unterschußenantiomerkurven an. Die Kurve der 'sichtbaren Racematmaxima' liegt, wie schon vorher diskutiert, über der Racematkurve. Die Retentionsunterschiede der einzelnen Teilchengruppen lassen sich dann in der Auftragung der relativen Retention  $\alpha$  gegen die  $Km_{(RR)}$ -Werte zusammenfassen, die in Abbildung 30 wiedergegeben ist.

Abbildung 30 : Auftragung der relativen Retention  $\alpha$  gegen Gleichgewichtskonstanten  $Km_{(RR)}$  für eine nichtracemische Mischung der optischen Reinheit 60 %ee (Parameter siehe Tabelle 6)



Das hier beschriebene Trennverhalten beruht ausschließlich auf Konzentrationseffekten. Sie sind, wie Rechnungen mit unterschiedlichen homochiralen und heterochiralen Dimerparametern zeigen, die treibende Kraft der Trennung. Hierzu ist exemplarisch jeweils für die  $Km_{(RR)}$ -Werte  $10^4$  l/mol (Abbildung 31) und  $10^7$  l/mol (Abbildung 32) die Gleichgewichtskonstante  $Km_{(RS)}$  im Bereich von  $10 - 10^5$  bzw.  $10^8$  l/mol variiert worden.

Abbildung 31 unterstreicht den geringen Einfluß von  $Km_{(RS)}$ . Durch eine Verringerung von  $Km_{(RS)}$  um eine Zehnerpotenz erreicht man noch eine Steigerung von  $\alpha$  um 0,75. Jede weitere Änderung ist jedoch wirkungslos. Große Variationen der internen Verhältnisse sind nicht zu beobachten. (In der Graphik 31 liegen die Summen-, Überschußdimer und Überschußmonomerkurve bzw. Unterschußdimer- und Unterschußmonomerkurve genau übereinander.)

Fast bedeutungslos erweist sich die Änderung der Gleichgewichtskonstante  $Km_{(RS)}$  in Abbildung 32. Zwar ergibt sich noch eine rein rechnerisch vorhandene Auftrennung, sie ist jedoch chromatographisch irrelevant. Mit einem bestmöglichen  $\alpha$  von 1,006 ist der Effekt der Variation von  $Km_{(RS)}$  hier vernachlässigbar.

Zu den in der Abbildung 32 dargestellten Graphen ist noch anzumerken, daß mit der verwendeten Bodenzahl das Auflösungsvermögen der Simulationen erreicht ist. Mikroprozesse sind für die unregelmäßige Form verantwortlich.

Abbildung 31 : Auftragung der Retentionszeitmaxima  $Rt_{(RR)}$ ,  $Rt_{(SS)}$ ,  $Rt_{(RS)}$ ,  $Rt_{(R)}$  und  $Rt_{(S)}$  gegen Gleichgewichtskonstanten  $Km_{(RS)}$  bei konstantem  $Km_{(RR)} = 10^4$  l/mol für eine nichtracemische Mischung der optischen Reinheit 60 %ee (Parameter siehe Tabelle 6)

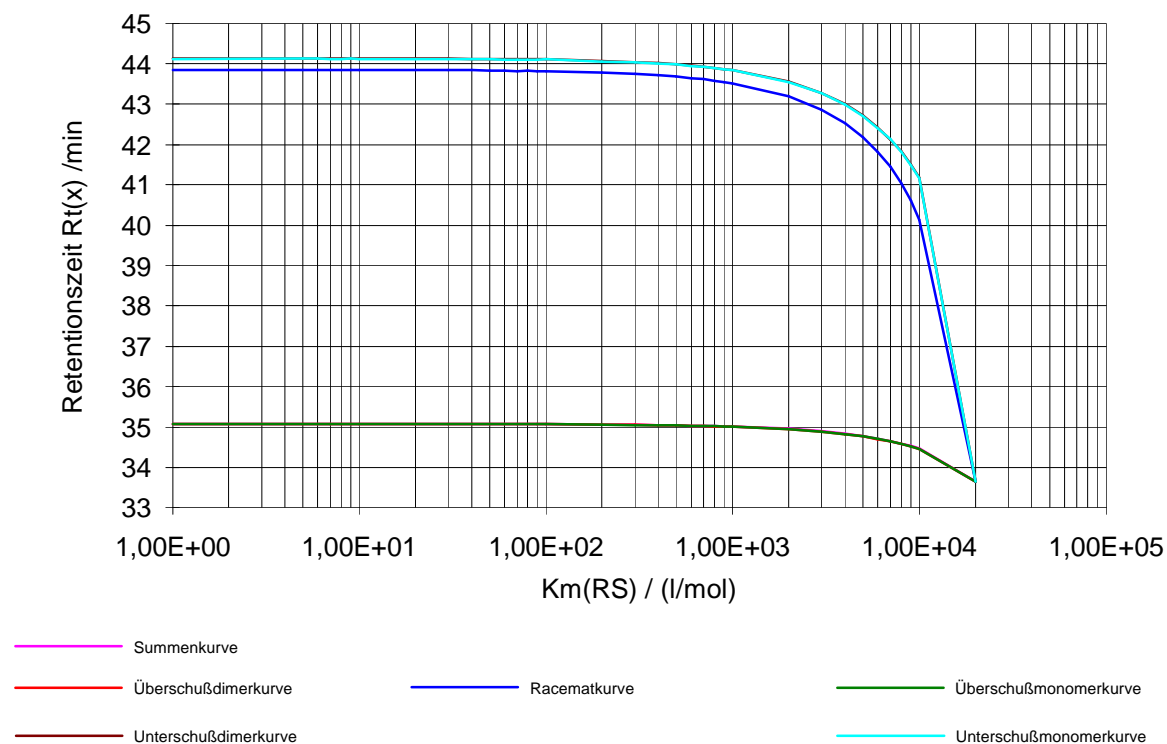
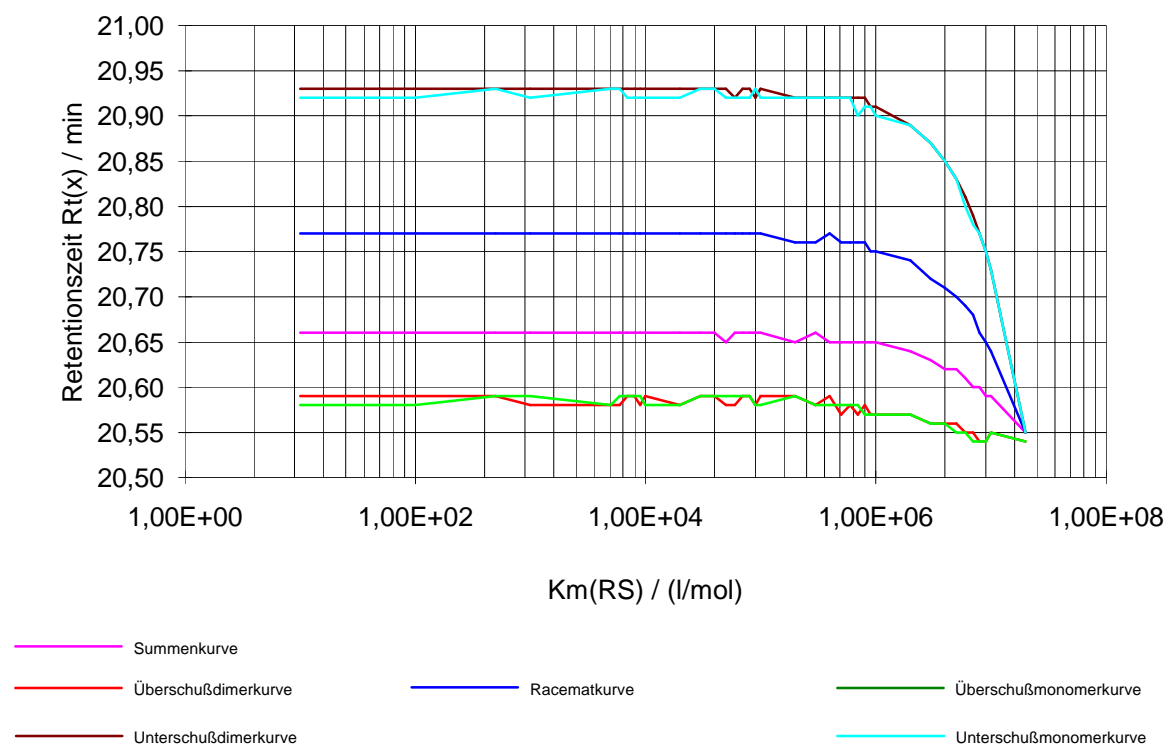


Abbildung 32 : Auftragung der Retentionszeitmaxima  $Rt_{(RR)}$ ,  $Rt_{(SS)}$ ,  $Rt_{(RS)}$ ,  $Rt_{(R)}$  und  $Rt_{(S)}$  gegen Gleichgewichtskonstanten  $Km_{(RS)}$  bei konstantem  $Km_{(RR)} = 10^7$  l/mol für eine nichtracemische Mischung der optischen Reinheit 60 %ee (Parameter siehe Tabelle 6)



#### 2.5.4. Zusammenfassung

Entscheidend für das Zustandekommen einer Enantiomerenüberschußabtrennung ist die Selbstkomplexierung.

Die Art der Überschußabtrennung ist abhängig von dem Verhältnis der Kapazitätsfaktoren. Dieses Verhältnis bestimmt die prinzipielle Form der Trennung.

1.  $\frac{k_{(R)}}{k_{(RR/RS)}} < 1$ : In diesem Fall zeigen die simulierten Chromatogramme ein Fronting. Die Kon-

zentrationenverhältnisse unter der Summenkurve der Simulationen erlauben auch in diesem Fall eine Trennung. Dies ist die einzig mögliche Trennungsform, falls eine ausschließliche Dimerisierung in der stationären Phase angenommen wird. Wie im folgendem kann man auch hier noch weiter zwischen einer Frontelution der Racematfraktion und der Überschußenantiomerfraktion unterscheiden.

2.  $\frac{k_{(R)}}{k_{(RR/RS)}} > 1$ : Falls diese Bedingung erfüllt ist, wird ein Tailing beobachtet. In unserem

Arbeitskreis wurden bisher lediglich diese Trennungsart experimentell vorgefunden. Deshalb soll auch nur sie weiter diskutiert werden.

Die Art der Trennung, Frontelution des Überschußenantiomers oder der Racematfraktion, wird vom Dimerisierungsgrad der homochiralen respektive heterochiralen Assoziate bestimmt. Die Kapazitätsfaktoren haben einen untergeordneten Einfluß. Die Grenzen zwischen diesen beiden Trennungsarten sind nicht eindeutig definiert.

1. Auf jeden Fall ergibt sich eine Frontelution des Überschußenantiomers, falls gilt:

$$2 K_{m(RR)} (1 + k_{(RR)}) > K_{m(RS)} (1 + k_{(RS)}) ; \frac{k_{(R)}}{k_{(RR)}} \gg 1$$

2. Die Umkehrung dieser Forderung bedingt nicht zwangsläufig eine Frontelution des Racematanteiles, da in diesem Fall der Kapazitätsfaktor  $k_{(RS)}$  noch einen entscheidenden Einfluß hat. Durch ihn ist immer noch ein Wechsel zur Frontelution des Überschußenantiomers möglich, vorausgesetzt es gilt  $K_{m(RS)} > K_{m(RR)}$ . Die Grenze dieses Überganges hängt von den restlichen Parametern ab.

Die Unterschiede in den Dimerstabilitäten haben nicht die eingangs angenommene entscheidende Bedeutung, auch nicht in Bezug auf die Qualität der Trennung. Trotz gleicher Dimerstabilitäten der homochiralen und heterochiralen Assoziate und auch identischer Kapazitätsfaktoren ist eine Trennung möglich. Sie wird nicht durch die chemisch unterschiedliche Eigenschaften der diastereomeren Komplexe hervorgerufen, sondern durch Konzentrationseffekte, die sich aus den Dimer-Monomer-Gleichgewichten ergeben.

Damit es zur Trennung kommt, muß der Betrag der Dimerisierungsenergie in einem bestimmten 'Energiefenster' liegen. Dieses ist abhängig von dem eingesetzten chromat-

graphischen System und den sich daraus ergebenden Parametern ( wie der Bodenzahl, den aus dem Fließmittel folgenden Kapazitätsfaktoren u.s.w.)

Es gibt einen Dimerisierungsgrad, der die Trennung stark begünstigt. Größere Abweichungen verhindern oder erschweren zumindest eine Separation. Dieser Dimerisierungsgrad stellt einen Kompromiß zwischen zwei aus der Assoziation resultierenden Effekten dar.

Zum einem wird durch die Bildung der diastereomeren Dimere die Trennung erst ermöglicht. Hohe Gleichgewichtskonstanten  $K_{m(RR)}$  und  $K_{m(RS)}$  würden also die Separation begünstigen.

Andererseits ist hiervon auch das zu diskriminierende Unterschußenantiomer betroffen. Eine Erniedrigung der  $K_{m(RS)}$ -Werte zur Kompensierung dieses Effektes hat aber den gegenteiligen Erfolg. Das Unterschußenantiomer bildet auf Grund des weiterhin hohen  $K_{m(RR)}$ -Wert vermehrt homochirale Assoziante. Der beste Weg, die Unterschußenantimere zu diskriminieren, ist, sie im Monomerezustand zu belassen. Ein niedriger Dimerisierungsgrad, speziell für sie, wäre gefordert. Da sich aber die homochiralen Dimere, bzw die R- und S-Monomere, prinzipiell chemisch gleich verhalten, ist diese Bedingung nicht erfüllbar. Auch eine Anpassung der Kapazitätsfaktoren  $k_{(RR)}$  und  $k_{(RS)}$  kann, wie man leicht einsieht, dieses Phänomen nicht beheben.

Abbildung 27 illustriert diesen Sachverhalt. Entsprechendes gilt auch für die Frontelution der Racematfraktion.

Die herausragende Bedeutung der homochiralen Dimerparameter ist hiermit noch einmal hervorgehoben worden. Die Simulationen zur reinen Enantiomeraufgabe konnten im weiteren den Einfluß der Gleichgewichtskonstanten  $K_{m(RR)}$  und der Kapazitätsfaktoren  $k_{(R)}$  ,  $k_{(RR)}$  offen legen.

Die Peakhöhe wird im Bereich genügend hoher Dimerisierung von der Gleichgewichtskonstanten  $K_{m(RR)}$  bestimmt. Die Peakschärfe, bzw das charakteristische Aussehen eines Enantiomerenüberschußchromatogramm ist hiervon nicht betroffen. Der Einfluß auf die Retentionszeit  $Rt_{max}$  ist relativ gering.

Die Kapazitätsfaktoren  $k_{(R)}$  ,  $k_{(RR)}$  regulieren im wesentlichen die Retentionszeit und die prinzipielle Form des Chromatogramms.

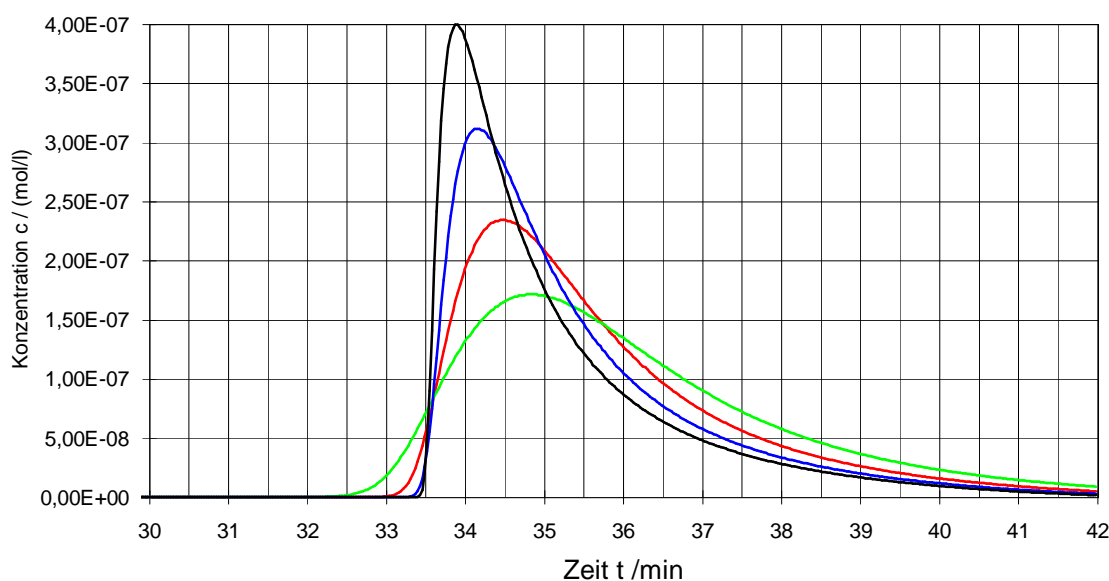
Wie die in Abbildung 30 dargestellte Auftragung der relativen Retentionen  $\alpha$  gegen die Gleichgewichtskonstante  $K_{m(RR)}$  zeigt, wird die Enantiomerenüberschußabtrennung nicht-racemischer Mischungen im wesentlichen durch Konzentrationseffekte geprägt. Lediglich unterschiedliche Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren der diastereomeren Dimere (RR, SS zu RS) können bei weitem nicht derartig hohe relative Retentionen  $\alpha$  bewirken. Hierbei ist die optische Reinheit von 60 ee% und die eingesetzte Aufgabemenge zu beachten. Ihre Veränderung hat einen wesentlichen Einfluß auf die relative Retention  $\alpha$ .

Die eingangs formulierte und in der Literatur weitgehend akzeptierte Modellvorstellung muß auf Grund der hier vorgestellten Simulationen und den sich daraus ergebenden Schlußfolgerungen verworfen oder zumindest weitgehend revidiert werden. Die von Gil Av und Schurig [ 7, 11, 12] geäußerten Modellvorstellungen bezüglich der stationären Phase und ihrer Rolle im Trennprozeß sind mit den hier dargestellten Rechnungen unvereinbar. Das gleiche gilt auch für Modelle die eine chirale Vorbelegung in irgendeiner Form fordern [8, 15, 16, 17, 18]. Die von Cundy und Dobashi [6, 9, 10] sowie Coors, Heinzerling und Matusch [4, 5, 14] vertretenen Vermutungen konnten in groben Zügen mit den durchgeführten Simulationen bestätigt werden. Es bleibt noch anzumerken, daß die Bedeutung der heterochiralen Dimerisierung von ihnen jedoch falsch eingeschätzt wurde.

## 2.6. Bedeutung der Bodenzahl

Die extreme Bedeutung der Bodenzahl einer Säule für das chromatographische Trennverhalten ist allgemein bekannt. Leider versagt nach den in der Literatur angegebenen Methoden [19] die Berechnung der Bodenzahl aus den experimentell gemessenen sowie auch aus den simulierten Chromatogrammen. Eine Reihe von Testsimulationen ergab, daß der Fuß sowie die Steigung der Front als einzige Anhaltspunkte zur Ermittlung der Bodenzahl herangezogen werden können. Bei vorgegebener Bodenzahl kann nur eine bestimmte Steigung der Front erreicht werden. Erhöht man die Bodenzahl so wird der Anstieg erwartungsgemäß steiler. Abbildung 33 (Parameter siehe Tabelle 7) illustriert dieses Verhalten am Beispiel einer reinen Enantio-merenaufgabe. Die hier gemachten Aussagen gelten natürlich auch für nicht chirale Verbindungen!

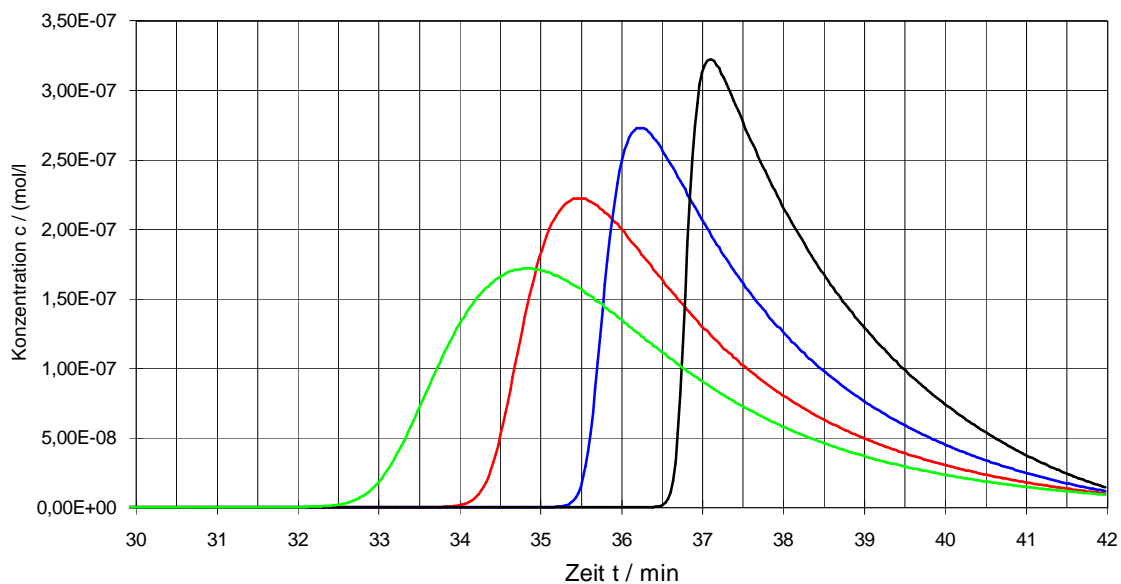
Abbildung 33 : Vergleich von Chromatogrammsimulationen mit unterschiedlicher Bodenzahl und ansonsten identischen Parametersätzen (Parameter siehe Tabelle 7)



Bodenzahl:      -- 4000                      -- 2000                      -- 1000                      -- 500

In einem gewissen Umfang läßt sich dieser Anstieg auch durch die entsprechende Wahl der Gleichgewichtskonstanten regulieren, aber deren Einfluß ist von wesentlich geringerer Bedeutung als die Bodenzahl. Grundsätzlich kann man jedes Retentionsverhalten durch entsprechende Kombination der Gleichgewichtskonstanten simulieren. Sie bestimmen in charakteristischer Weise den Abfall der Substanzkonzentration pro Zeiteinheit. Simuliert ein bestimmter Satz von Parametern diesen Abfall zufriedenstellend, jedoch nur ungenügend den Anstieg der Front, so kann dieses Problem nicht durch eine andere Gleichgewichtskonstantenwahl behoben werden. Durch eine Angleichung der Bodenzahl an die Frontsteigung kann dann die korrekte Simulationen erzeugt werden. Jedoch ist hierbei zu berücksichtigen, daß die Änderung der Bodenzahl bei gleichbleibendem Säulenvolumen eine Vergrößerung, bzw. Verkleinerung des theoretischen Trennbodenvolumens zur Folge hat. Auf Grund der Konzentrationsabhängigkeit der Dimerisierung stellt sich nun ein prinzipiell anderes Gleichgewicht ein. Durch eine Bodenzahlerhöhung wird die Wirkung der Gleichgewichtskonstante  $K_{m(RR)}$  gesteigert. Wie man Abbildung 33 entnehmen kann, variiert die Retentionszeit  $Rt_{max}$  nicht sehr stark mit der Bodenzahländerung. Sie nimmt bei der Erhöhung auf 4000 Trennböden lediglich um eine Minute ab. Die Steigung der Front und die Peakhöhe nehmen aber drastisch zu.

Abbildung 34 : Vergleich von Chromatogrammsimulationen mit unterschiedlicher Bodenzahl (ausgehend von Abbildung 33) nach durchgeführter Trennbodenvolumenkorrektur (Parameter siehe Tabelle 7)



Bodenzahl:      -- 4000                      -- 2000                      -- 1000                      -- 500

Mit den um die Volumenänderung berichtigten Gleichgewichtskonstanten  $Km_{(RR)}$  können Chromatogramme berechnet werden, die der ursprünglichen Form näher stehen. Diese partielle Verbesserung ergibt sich, wenn man die Gleichgewichtskonstanten mit dem Volumenverhältnis wie folgt korrigiert.

$$\frac{V^{(1)}}{V^{(2)}} = \frac{Km_{(RR)}^{(2)}}{Km_{(RR)}^{(1)}} \quad (63),$$

wobei  $V$  das Trennbodenvolumen ist.

Die Retentionszeiten  $Rt_{\max}$  sind nun aber gänzlich verschieden. In Abbildung 34 sind die entsprechenden Simulationen dargestellt. Die verwendeten Parameter und die zur Zuordnung benötigten Retentionszeiten  $Rt_{\max}$  enthält Tabelle (7).

Eine weitere Korrektur der Retentionszeiten mit Hilfe der Gleichung (61) stellt dann eine dem ursprünglichen Chromatogramm ähnlichere Zeitabhängigkeit wieder her. Mit ihr ergeben sich dann die in Abbildung 35 gezeigten Chromatogramme unter Verwendung der in Tabelle 7 aufgelisteten Parameter.

Abbildung 35 : Vergleich von Chromatogrammsimulationen mit unterschiedlicher Bodenzahl (ausgehend von Abbildung 33) nach durchgeführter Trennbodenvolumenkorrektur und anschließender Retentionszeitkorrektur (Parameter siehe Tabelle 7)

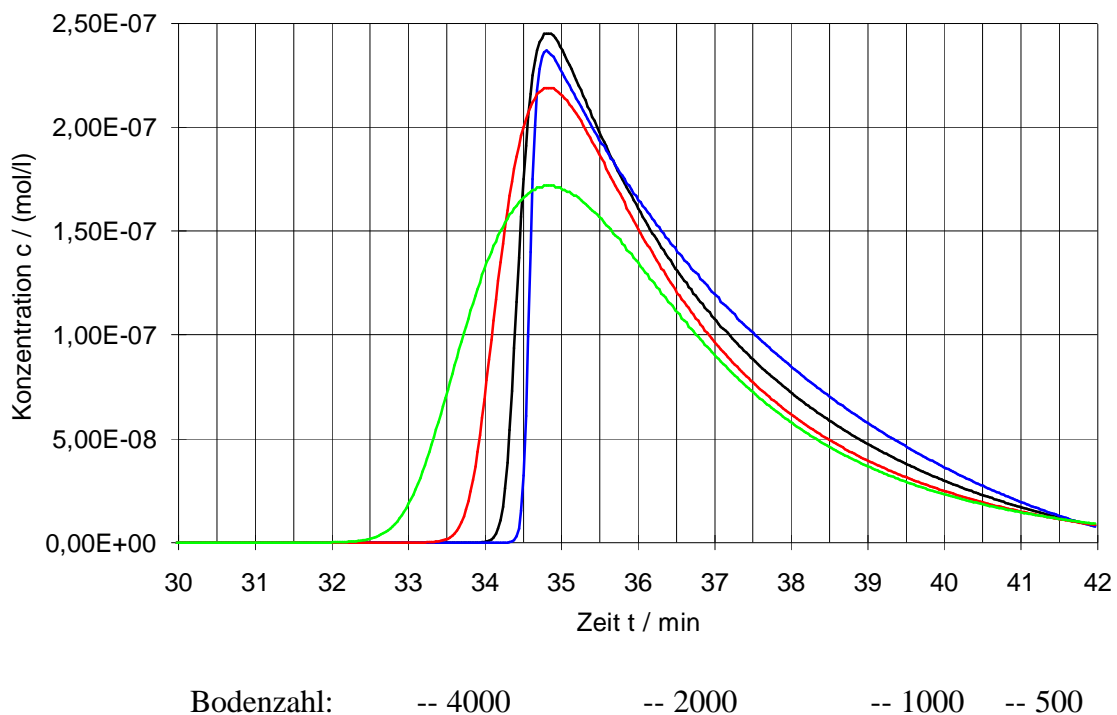




Tabelle 7 : Parameter zu den Chromatogrammsimulationen mit unterschiedlichen Bodenzahlen

Abbildung/ Simulation	$R_{t(RR)}$ / min	$R_{t(R)}$ / min	$K_{m(RR)}$ / (l/mol)	$R_{t_{max}}$ / min	Bodenzahl
33/20.1	31.74	41.95	$4 \cdot 10^4$	34.82	500
33/20.2				34.47	1000
33/20.3				34.15	2000
33/20.4				33.88	4000
34/21.1	31.74	41.95	$4 \cdot 10^4$	34.82	500
34/21.2				35.45	1000
34/21.3				36.22	2000
34/21.4				37.09	4000
35/22.1	31.74	41.95	$4 \cdot 10^4$	34.82	500
35/22.2	30.744	41.95	$4 \cdot 10^4$	34.83	1000
35/22.3	29.00	41.95	$4 \cdot 10^4$	28.13	2000
35/22.4	25.49	41.95	$4 \cdot 10^4$	28.46	4000

Sonstige Parameter:

$t_0$  : 3min  $\beta$  : 1  $V$  : 3.14 ml Aufgabemenge  $n_R$  :  $6.99 \cdot 10^{-7}$  mol

## 2.7. Eindeutigkeit der Chromatogrammsimulationen

Da es Ziel dieser Simulationen ist, neben der Entwicklung eines Modells zur Enantiomerenüberschußabtrennung, auch experimentell gemessene Chromatogramme anzupassen, erhebt sich die Frage, in wie weit berechnete Trennungen auch eindeutig sind. Ist die Simulation eines gemessenen Chromatogramms mit nur einem einzigen Parametersatz möglich, oder führen auch verschiedene Parametersätze zu identischen Chromatogrammen?

### 2.7.1. Systematisch bedingte Identitäten

Bei der Eingabe der Parameter zur Simulation eines Chromatogramms geht man nicht von den Kapazitätsfaktoren aus, sondern von den dem Experiment näherstehenden Retentions- und Totzeiten. Aus ihnen berechnet man die benötigten Größen gemäß den Gleichungen (6)-(11). Ändert man die Retentionszeiten und die Totzeiten so, daß die Werte der Kapazitätsfaktoren gleich bleiben, erhält man ein Chromatogramm mit lediglich veränderter Zeitachse. Das Chromatogramm wird zeitlich gestaucht oder gestreckt.

Eine Änderung des Säulenvolumens  $V$  entspricht einer Vergrößerung oder Verkleinerung der Gleichgewichtskonstanten um den selben Faktor. Verschiedene Parametersätze mit unterschiedlichen Gleichgewichtskonstanten und Säulenvolumen können somit

identische Chromatogramme ergeben. Ebenso ist dies möglich bei unterschiedlichen Phasenvolumenverhältnissen und damit einhergehenden Änderungen sowohl der Gleichgewichtskonstanten und der Retentionszeiten, als auch der Totzeiten.

#### 2.7.2. Parametersatzabhängige Identitäten

Die Hauptaufgabe des Simulationsprogramms ist die Berechnung der jeweiligen Konzentrationen in den diversen Trennböden. Geht man von dem 1. Schritt der Simulation aus, so wird nach dem Einsetzen der Aufgabemenge das sich einstellende Gleichgewicht nach Gleichung (44) berechnet. Dieses Polynom 4. Grades besitzt, wie im praktischen Teil noch gezeigt wird, nur eine chemisch sinnvolle Lösung. Wiederholtes Anwenden dieser Operation kann diese Eindeutigkeit nicht zerstören. Das Programm ist somit in sich eindeutig. Eine rigorose Beweisführung, daß man mit verschiedenen Parametersätzen keine numerisch identische Simulationen erzielt, kann aber wegen der Komplexität des Trennvorganges nicht angetreten werden. (Die oben erwähnten systematischen Identitäten sind hierbei ausgeschlossen.) Die Erfahrungen mit dem Programm und die Schwierigkeiten, ein vorgegebenes Chromatogramm zu simulieren, legen jedoch eine Eindeutigkeit nahe. Zwei oder auch mehrere numerisch identische Lösungen zu einem gestelltem Problem sind bislang noch nicht beobachtet worden.

### 3. Berechnung diastereomerer Komplexe

Bevor mit dem im letzten Kapitel vorgestellten Modell zur Enantiomerenüberschußabtrennung Simulationen von experimentell gemessenen Chromatogrammen durchgeführt werden, müssen in diesem Kapitel die Voraussetzungen zur Berechnung der Geometrien und Energien der diastereomeren Komplexe beschrieben werden, die für die Trennwirkung verantwortlich sind.

#### 3.1. Vorgehensweise

Um den Trennprozeß mittels quantenchemischer oder auch Kraftfeldverfahren aufzuklären, wurde folgendermaßen vorgegangen :

##### 1. Ermittlung des globalen Energieminimums

Von der zur Enantiomerenüberschußabtrennung befähigten Verbindung wurden zuerst möglichst alle strukturelevanten Konformationen erzeugt und energieoptimiert. So konnte, je nach verwendetem Verfahren, das globale Energieminimum berechnet und die energetische Reihenfolge der gefundenen Konformere bestimmt werden.

##### 2. Berechnung der Dimergeometrien

Danach wurde untersucht, welche der Konformationen zur Dimerbildung befähigt sind und wie sie sich sowohl geometrisch als auch energetisch von der globalen Minimumsform unterscheiden. Mit einer Auswahl energetisch günstiger Konformere wurden dann homochirale bzw. heterochirale Dimere konstruiert und diese dann einer Geometrieoptimierung unterworfen. Hierbei wurde die aus der Chromatographie bekannte Dreipunktregel in abgewandelter Form berücksichtigt. Damit es zur Bildung diastereomer Assoziate kommt, müssen zwei potentielle Wechselwirkungsstellen gefunden und miteinander in Kontakt gebracht werden. Die Dreipunktregel der Chromatographie dagegen fordert, daß zur chromatographischen Auftrennung von Enantiomeren drei Wechselwirkungsstellen vorhanden sein müssen [20]. Die so erhaltenen Dimeren bilden die Grundlage aller weiteren Untersuchungen. Aus den berechneten Bildungsenergien kann jetzt schon qualitativ abgeschätzt werden, ob eine Enantiomerenüberschußabtrennung rechnerisch nachvollziehbar ist.

##### 3. Erfassung der chromatographischen Trennung

Die eigentliche Trennung kann man erst dann beurteilen, wenn noch weitere Aggregatsenergien bekannt sind. Wie bereits im letzten Kapitel dargelegt wurde, ist die Enantiomerenüberschußabtrennung durch die Wechselwirkung der Monomeren sowie der homochiralen und heterochiralen Dimeren mit der stationären bzw. der mobilen Phase charakterisiert. Da in den hier untersuchten experimentellen Trennungen ausschließlich derivatisierte Propylaminphasen Verwendung fanden, wurde in den Rechnungen das Propylamin selber als Modell für die stationäre Phase angenommen. Die mobile Phase bestand bei fast allen Trennungen aus einem Hexan/Isopropanol Gemisch mit unterschiedlichen Mischungsverhältnissen. Lediglich im Falle der Arylcarbinole und der Trögerschen Base wurde ein

Hexan/Dichlormethan Gemisch eingesetzt. In erster Näherung ist das Hexan als inert anzusehen. Deshalb wurde für die mobile Phase nur Isopropanol und Dichlormethan in den Rechnungen berücksichtigt. Dementsprechend ergeben sich für die Trennung folgende drei Modelle, in der das Fließmittel, beispielsweise Isopropanol, unterschiedlich Berücksichtigung findet.

1. Im ersten Ansatz wird die mobile Phase als generell inert betrachtet. Es müssen dann die Bildungsenergien der Monomere und der diastereomeren Dimere ermittelt werden (R bzw. S, RR bzw. SS, RS). Das Adsorptionsverhalten der Substanzen an der stationären Phase wird dann durch die jeweilige Wechselwirkungsenergien der drei Spezies zum Propylamin (Pa) wiedergegeben ( $R\cdot Pa$  bzw.  $S\cdot Pa$ ,  $RR\cdot Pa$  bzw.  $SS\cdot Pa$ ,  $RS\cdot Pa$ ).

2. Das zweite Modell erhält man durch eine Verfeinerung des ersten, indem man in der mobilen Phase Aggregate der einzelnen Spezies mit einem Isopropanol (Al) annimmt ( $R\cdot Al$  bzw.  $S\cdot Al$ ,  $RR\cdot Al$  bzw.  $SS\cdot Al$ ,  $RS\cdot Al$ ). Für die stationäre Phase wird das Isopropanol im Aggregat durch ein Propylaminmolekül ersetzt ( $R\cdot Pa$  bzw.  $S\cdot Pa$ ,  $RR\cdot Pa$  bzw.  $SS\cdot Pa$ ,  $RS\cdot Pa$ ).

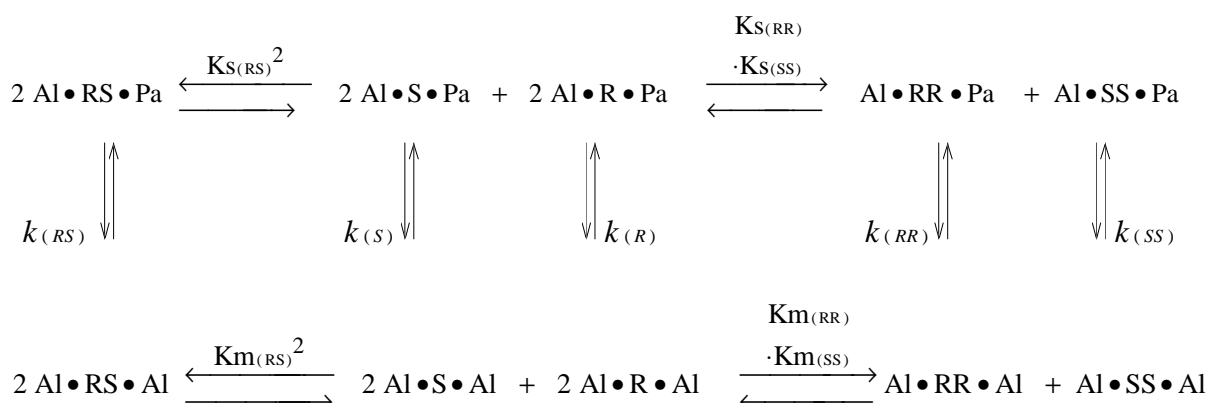
3. In einer dritten Variante wird das Fließmittel durch 2 Alkohole vertreten ( $R\cdot Al\cdot Al$  bzw.  $S\cdot Al\cdot Al$ ,  $RR\cdot Al\cdot Al$  bzw.  $SS\cdot Al\cdot Al$ ,  $RS\cdot Al\cdot Al$ ). In der stationären Phase wird wiederum ein Isopropanolmolekül durch ein Propylaminmolekül ersetzt. Mit diesem Ansatz wird erwartet, daß das Verhalten der Monomere gegenüber den Dimeren genauer erfaßt wird. Ebenso sollte es möglich sein, kooperative Effekte der Wasserstoffbrücken und anderer Wechselwirkungen ansatzweise zu untersuchen ( $R\cdot Pa\cdot Al$  bzw.  $S\cdot Pa\cdot Al$ ,  $RR\cdot Pa\cdot Al$  bzw.  $SS\cdot Pa\cdot Al$ ,  $RS\cdot Pa\cdot Al$ ).

Die fortschreitende Simulation der mobilen Phase kann noch weiter geführt werden, aber die Kapazitäten der verfügbaren Rechner beschränken derartige Rechnungen auf dieses Approximationsniveau.

Aus den so erhaltenen Bildungsenergien der entsprechenden Aggregate können dann, wie z.B. aus der schematischen Darstellung zur Variante 3 (Abbildung 36) zu entnehmen ist, Rückschlüsse auf das Enantiomerenüberschußtrennverhalten gezogen werden.

Wenn man annimmt, daß die aus den Kraftfeldrechnungen bzw. semiempirischen Verfahren gewonnenen Bildungsenergien bzw. Bildungsenthalpien näherungsweise den freien Energien entsprechen, kann man gemäß Gleichung (45) diese Bildungsenergien in Gleichgewichtskonstanten umrechnen. Somit ist ein direkter Vergleich zwischen den mikroskopisch und makroskopisch bestimmten Gleichgewichtskonstanten möglich, die man aus den berechneten Bildungsenergien der Aggregate sowie den Chromatogrammsimulationen erhalten kann.

Abbildung 36 : Schematische Darstellung der für die Enantiomerenüberschußabtrennung zu berechnenden Aggregate (Variante 3)



### 3.2. Verfahren

Zur Berechnung der Geometrien und der Bildungsenergien wurden quantenchemische Methoden sowie Kraftfeldverfahren herangezogen, die in den folgenden Abschnitten beschrieben werden.

#### 3.2.1. MNDO-Methoden

Unter den quantenchemischen Verfahren wurden lediglich die semiempirischen, zum Umfeld der MNDO-Methode [21] gehörigen MNDO-M (modified neglect of diatomic overlap - modified) [22], AM1 (Austin Modell 1) [23], MNDO-PM3 (parametric method 3) [24] Verfahren eingesetzt.

Die MNDO-Methode stellt ein semiempirisches Allvalenzelektronen-SCF- (self consistent field) Verfahren dar [21]. Ihr liegt die NDDO- (neglect of diatomic differential overlap) Näherung zugrunde [25]. Diese ist durch folgende Approximationen charakterisiert:

1. Zur Lösung der Säkulargleichung wird die verwendete AO- (atomic orbital) Basis bereits als orthogonal angenommen, so daß sich das allgemeine Eigenwertproblem vereinfacht.

$$\text{FC} = \text{SCE} \approx \text{CE} \quad (64)$$

F:	Fockmatrix
C:	Eigenvektormatrix
S:	Überlappungsmatrix
E:	Eigenwertmatrix

2. In der Core-Hamilton-Matrix  $H^c$  werden nur wenige Mehrzentrenintegrale berücksichtigt. Lediglich die Resonanzintegrale  $\beta_{\mu\nu}^{AB}$  ( $\mu, \nu$ : Orbitalindizes; A, B: Atomindizes) sowie die Zweizentren-Core-Elektronanziehungsintegrale  $V_{\mu\nu,B}^{AA}$  bleiben erhalten.

3. Die differentielle Überlappung zweier Basisfunktionen  $\phi_\mu^A$  und  $\phi_\nu^B$  an unterschiedlichen Atomen A und B wird zur Berechnung der Zweielektronenintegrale gleich null gesetzt.

$$(\phi_\mu^A \phi_\nu^B | \phi_\lambda^C \phi_\rho^D) = \delta_{AB} \delta_{CD} (\phi_\mu^A \phi_\nu^A | \phi_\lambda^C \phi_\rho^C) \quad (65)$$

Das MNDO-Verfahren benutzt eine STO- (Slater type orbital) Basis  $\{\chi\}$ . Die verbleibenden Zweielektronenintegrale erhält man durch eine semiempirische Multipolentwicklung [26]. Entsprechend der Goeppert-Mayer-Sklar-Näherung [27, 25] werden diese zur Berechnung der Zweizentren-Core-Elektronanziehungsintegrale des Typs  $V_{\mu\nu,B}^{AA}$  herangezogen.

$$V_{\mu\nu,B}^{AA} = -Z^B (\mu^A v^A | s^B s^B) \quad (66)$$

$Z^B$ : Core-Ladung des Atoms B  
 $s^B$ : s-STO der Valenzschale an Atom B

Die Resonanzintegrale  $\beta_{\mu\nu}^{AB}$  ergeben sich durch eine modifizierte Mulliken-Näherung [28, 29]. Hier sind  $\beta^A$ ,  $\beta^B$  elementspezifisch und  $\kappa_\mu^A$ ,  $\kappa_\nu^B$  AO- (atomic orbital) spezifisch angepasste Parameter.

$$\beta_{\mu\nu}^{AB} = \frac{1}{2} S_{\mu\nu} (\kappa_\mu^A \beta^A + \kappa_\nu^B \beta^B) \quad (67)$$

$S_{\mu\nu}$ : Überlappungsintegral zwischen den AOs  $\chi_\mu^A$  und  $\chi_\nu^B$

Der Parameter  $U_{\mu\mu}$  erfaßt die kinetische Energie und die Core-Elektronanziehung zum Atomrumpf A eines Elektrons im AO  $\chi_\mu^A$ .

Die Matrixelemente des Fockoperators setzen sich dann wie folgt zusammen:

$$F_{\mu\mu}^{AA} = U_{\mu\mu} + \sum_{B(\neq A)} V_{\mu\mu,B}^{AA} + \sum_{v^A} P_{\mu\mu}^{AA} [(\mu^A \mu^A | v^A v^A) - \frac{1}{2} (\mu^A v^A | \mu^A v^A)] + \sum_{B(\neq A)} \sum_{\lambda^B \rho^B} P_{\lambda\rho}^{BB} (\mu^A \mu^A | \lambda^B \rho^B) \quad (68)$$

$$F_{\mu\nu}^{AA} = \sum_{B(\neq A)} V_{\mu\nu,B}^{AA} + \frac{1}{2} \sum_{v^A} P_{\mu\nu}^{AA} [3(\mu^A v^A | \mu^A v^A) - \frac{1}{2} (\mu^A v^A | \mu^A v^A)] + \sum_{B(\neq A)} \sum_{\lambda^B \rho^B} P_{\lambda\rho}^{BB} (\mu^A \mu^A | \lambda^B \rho^B) \quad (69)$$

$$F_{\mu\nu}^{AB} = \beta_{\mu\nu}^{AB} - \frac{1}{2} \sum_{\lambda^A} \sum_{\rho^B} P_{\lambda\rho}^{AB} (\mu^A \mu^A | \lambda^B \rho^B) \quad (70)$$

wobei  $P_{\mu\nu}^{AB}$  ein Element der Dichtematrix ist.

Im Rahmen der MNDO-Näherung ergibt sich dann die elektronische Energie  $E_{el}$  als :

$$E_{el} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \sum_{\nu} P_{\mu\nu} (H_{\mu\nu} + F_{\mu\nu}) \quad (71)$$

$H_{\mu\nu}$ : Core-Hamiltonianmatrix

Die Gesamtenergie  $E_{tot}^{mol}$  der zu berechnenden Verbindung setzt sich aus der elektronischen Energie und der Core-Core Abstoßung  $E_{AB}^{core}$  zwischen den Atomen A und B zusammen.

$$E_{tot}^{mol} = E_{el} + \sum_{A < B} E_{AB}^{core} \quad (72)$$

$$E_{AB}^{core} = Z_A Z_B (s^A s^A | s^B s^B) (1 + e^{-\alpha_A R_{AB}} + e^{-\alpha_B R_{AB}}) \quad (73)$$

Ein leicht modifizierter Ausdruck gilt für NH bzw. OH Paare

$$E_{AB}^{core} = Z_A Z_B (s^X s^X | s^H s^H) (1 + \frac{R_{XH}}{10^{-10} m} e^{-\alpha_X R_{XH}} + e^{-\alpha_H R_{XH}}) \quad \text{für } X=N,O \quad (74)$$

Die durch  $E_{AB}^{core}$  eingeführte Näherung der Kern-Kernabstoßung und der Core-Elektronenwechselwirkung in einem Term, ist der einzige methodische Unterschied in dem sich die genannten Verfahren vom theoretischen Standpunkt her voneinander unterscheiden. Die ursprüngliche MNDO-Methode vermag Wasserstoffbrückenbindungen nicht realistisch wiederzugeben. Es gab zahlreiche Versuche (z.B. MNDO/H [30], MNDO-M) diesen Schwachpunkt, unter Erhalt der ursprünglichen Parametrisierung, zu beheben. Im MNDO-M-Verfahren wird nur für die Wasserstoffbrückenpartner, die vor der Rechnung dem Programm explizit anzugeben sind, der Formalismus der Core-Core Abstoßung und ihrer Parameter geändert. Ansonsten bleibt es bei der ursprünglichen Methode.

$$^{MNDO-M}E_{AB}^{core} = Z_A Z_B (s^X s^X | s^H s^H) (1 + A_{XH} e^{-\alpha_X(R_{XH}-C_{XH})^2} + B_{XH} e^{-\alpha_X(R_{XH}-D_{XH})^2}) \quad \text{für } X=N,O \quad (75)$$

mit den speziellen Wasserstoffbrückenparametern :  $\alpha_X, A_{XH}, B_{XH}, C_{XH}, D_{XH}$

Im AM1 und dem PM3-Verfahren werden die Ansätze der beiden angeführten MNDO-Varianten vereinigt. AM1 und PM3 unterscheiden sich aber in der Anzahl der zur Wiedergabe der Core-Core-Abstoßung benutzten Funktionen. Während PM3 pro Atom nur 2 zusätzliche Gaussfunktionen benutzt ( $i, j=2$ ), können im Falle des AM1-Verfahrens bis zu 4 zusätzliche Terme notwendig sein ( $i^{max}, j^{max}=4$ ).

$$^{AM1/PM3}E_{AB}^{core} = Z_A Z_B ((s^A s^A | s^B s^B) + (s^A s^A | s^B s^B) e^{-\alpha_A R_{AB}} + \frac{1}{R_{AB}} \sum_i K_{Ai} e^{-L_{Ai}(R_{AB}-M_{Ai})^2} + (s^A s^A | s^B s^B) e^{-\alpha_B R_{AB}} + \frac{1}{R_{AB}} \sum_j K_{Bj} e^{-L_{Bj}(R_{AB}-M_{Bj})^2}) \quad (76)$$

Desweiteren unterscheiden sich die MNDO-, AM1- und PM3-Verfahren in ihrer Parametrisierung. Einerseits wurden unterschiedliche Algorithmen, Sätze an Referenzmolekülen und Referenzeigenschaften verwendet, andererseits variierte die Anzahl der zur Parametrisierung freigegebenen Werte.

### 3.2.2. Kraftfeldverfahren

Es wurden die drei Kraftfelder MM2, MM3 und AMBER aus dem Macromodel-Programmpaket [31] benutzt. Sie unterscheiden sich in einigen Punkten von den Originalprogrammen von Allinger und Kollmann.

MM2 [32] und MM3 [33] sind als Allzweckkraftfelder entwickelt worden. Durch ihre häufige Verwendung sind sie in der Literatur gut dokumentiert. MM2 benötigt die explizite Angabe von freien Elektronenpaaren, MM3 und AMBER dagegen nicht. In der Macromodel-Version sind folgende Änderungen gegenüber den Originalversionen vorgenommen worden.

MM2/MM3 Allinger	MM2/MM3 Macromodel
Die Elektrostatik, damit auch die weitreichenden Wechselwirkungen, werden durch Dipol-Dipolwechselwirkungen wiedergegeben.	Den einzelnen Atomen werden Partialladungen aufgesetzt.
Zur Berechnung der Wasserstoffbrücken werden die Ladungsverteilung sowie bei Bedarf spezielle Van-der-Waals-Parameter herangezogen.	Es werden an das Amberkraftfeld angenäherte Parameter für Wasserstoffbrücken verwendet. Deshalb müssen die freien Elektronenpaare an Estern und Aryl-O Sauerstoffatomen im MM2-Verfahren entfernt werden.
$\pi$ -Systemparameter werden durch eine $\pi$ -SCF-Rechnung ermittelt.	Dem Programm werden eigens hierfür neu entwickelte Torsionsparameter zur Verfügung gestellt. Sie wurden an vorhandene MM3 Parameter angepasst oder aber aus Ab-initio Rechnungen ermittelt.
Die 'Out-of-plane'-Schwingung wird durch einen die Senkrechte zur Ebene erfassenden Parameter beschrieben.	Die 'Out-of-plane'-Schwingung wird durch einen uneigentlichen Diederwinkel beschrieben, der sein Energieminimum bei 180° hat.

Der Macromodel-Parametersatz ist gegenüber dem von Allinger wesentlich erweitert, so daß Substrukturen die nicht im ursprünglichen MM2/MM3 Program enthalten sind, berechnet werden können (z.B im Falle des Anthryltrifluorethanol). Deshalb wurde auf die Macromodel-Versionen zurückgegriffen.

Das AMBER-Kraftfeld [34] ist für die vorzugsweise Berechnung von Peptiden entwickelt worden. Im Zusammenhang mit den beschriebenen Rechnungen wurde es in der 'all-atom' - Variante verwendet. Der ursprüngliche Parametersatz [34] ist in dem Macromodelprogramm enthalten. Jedoch erweitern zusätzliche Parameter das Anwendungsspektrum, so daß das Verfahren in der Anwendbarkeit dem MM2- und dem MM3 Programm gleichwertig ist.

### **3.3. Berechnung intermolekularer Wechselwirkungen mit Kraftfeld bzw. semi-empirischen Verfahren.**

Ein Ziel dieser Arbeit besteht darin, die Geometrien und Bildungsenergien der Komplexe zu bestimmen, die für die Enantiomerenüberschußabtrennung verantwortlich sind. Deshalb wurden zu einer Reihe von Modellaggregaten die zwischenmolekularen Wechselwirkungen mit



verschiedenen Verfahren berechnet. Die erhaltenen Ergebnisse werden nun miteinander verglichen und den experimentellen Daten, soweit vorhanden, gegenübergestellt werden.

In der Chromatographie ordnet man die eine Trennung hervorrufenden intermolekularen Kräfte drei Gruppen zu :

Wasserstoffbrückenbindung

Dipol-Dipol-Wechselwirkungen

$\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen

Diese Aufteilung entspricht nicht ganz der Terminologie, die in der Quantenchemie üblich ist. Zum Teil sind diese Wechselwirkungen nicht klar definiert, wie z.B. die  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen [84], andererseits ist noch nicht eindeutig geklärt, mit welchen Verfahren und welchem rechentechnischen Aufwand sie korrekt erfaßt werden können.

Die semiempirischen, quantenchemischen Verfahren, die der Gruppe der MNDO-Methoden angehören, wie MNDO-M, AM1 und PM3, können prinzipiell diese Wechselwirkungen beschreiben. Ob jedoch eine reine SCF-Rechnung, ohne anschließenden CI-Teil ( configuration interaction), intermolekulare Wechselwirkungen zufriedenstellend wiedergeben kann, ist ungeklärt. Laut Thiel [35] ist in keiner Weise gesichert, in wie weit schon CI-Effekte durch die Parametrisierung in den MNDO-Hamiltonian eingeflossen sind. Da aber in den noch folgenden Rechnungen Komplexe, die zuweilen aus über 100 Atome bestehen, behandelt werden, sind dem SCF-Teil sich anschließende CI-Rechnungen rechenzeitmäßig einfach zu teuer und es wurde daher auf sie verzichtet.

Zum Teil sind auch schon zwischenmolekulare Wechselwirkungen in den Verfahren zur Bestimmung der empirischen Parameter berücksichtigt worden. Der ursprüngliche MNDO-Parametersatz vermag keine Wasserstoffbrückenbindungen vernünftig wiederzugeben. Bei der Parametrisierung der AM1 und PM3-Verfahren wurden jedoch Wasserstoffbrücken explizit berücksichtigt. MNDO-M verfügt über einen gesondert entwickelten Parametersatz. Aber es sind auch Unzulänglichkeiten der Verfahren bei der Berechnung von intermolekularen Wechselwirkungen bekannt [36, 37, 38, 39]. Der gravierendste Fehler unterläuft wohl dem AM1-Verfahren, das die H<sub>2</sub>O-Dimer-Geometrie am globalen Energieminimum nicht korrekt reproduziert [40].

Da es sich bei der MNDO-Methode um ein Allvalenzelektronenverfahren handelt, gehen Dipolwechselwirkungen, die aus der Elektronenstruktur und der Coreladung resultieren, per se in die Rechnungen ein. Der allgemeine Fehler für die Wiedergabe von Dipolmomenten, aus denen die wichtigsten zwischenmolekularen Wechselwirkungen resultieren, wird mit 0.5 D (MNDO) bzw. 0.4 D (AM1, PM3) angegeben [41, 42 ,43].

$\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen wurden lediglich bei der Parametrisierung des PM3-Verfahrens unter Verwendung des Benzol-Dimers als Referenz berücksichtigt. Im Gegensatz zu den Kraftfeldverfahren ist noch darauf hinzuweisen, daß die semiempirischen Verfahren vom

theoretischen Formalismus her keinen Unterschied zwischen inter- und intramolekularen Wechselwirkungen kennen.

Kraftfeldrechnungen basieren auf einer rein empirischen Methode. Für jedes Atom und für jede Bindung wurde entsprechend der molekularen Umgebung ein umfangreicher Parametersatz entwickelt und mit Hilfe experimenteller Daten oder hochwertiger Ab initio-Rechnungen kalibriert. Die Parametersätze wurden zur Berechnung von Molekülen entwickelt. Zur Wiedergabe zwischenmolekularer Wechselwirkungen sind die elektrostatischen Wechselwirkungen von extremer Bedeutung. Sie gehen als die einzigen weitreichenden Kräfte in den Parametersatz ein. Zur Verbesserung der Ergebnisse wird häufig die Verwendung aufgesetzter Partialladungen empfohlen, die man aus höherwertigen Rechnungen erhalten kann und eine problemspezifische Parametersatzerweiterung darstellen. Inwieweit hierdurch der ursprüngliche getestete Parametersatz beeinflusst oder gar zerstört wird, ist gänzlich unbekannt. Entweder vermag ein Kraftfeld ein Problem angemessen zu lösen, oder die Parameter müssen weiter verfeinert werden; das heißt: Man wendet sich einem neuem Kraftfeld zu. Zu Testrechnungen an kleinen Modellmolekülen wird dringendst geraten [31], wobei man sich aber bewußt sein sollte, daß bei der eigentlichen Aufgabenstellung die Rechnungen immer noch durch andere Effekte verfälscht werden könnten.

### 3.3.1. Benzol-Benzol-Wechselwirkungen

In einer ersten Testreihe wurden als Modell für eine  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkung die intermolekularen Wechselwirkungen zwischen zwei Benzolmolekülen abstandsabhängig untersucht. Abbildung 37 zeigt die Abhängigkeit der Wechselwirkungsenergie von dem Schwerpunktsabstand der beiden Benzolmoleküle, die in einer Sandwichgeometrie vorliegen.

Besonders auffällig ist der vom Triposkraftfeld [44] berechnete energetische Kurvenverlauf, der auf viel zu hohe Assoziationsenergien<sup>1</sup> und auf einen viel zu geringen Dimerabstand der Minimumsgeometrie hinweist. Auch aufgesetzte Ladungen konnten dies nicht verbessern. Aus diesem Grunde und der auch schon in [45] dokumentierten schlechten Qualität wurde dieses Verfahren in den weiteren Untersuchungen nicht mehr berücksichtigt.

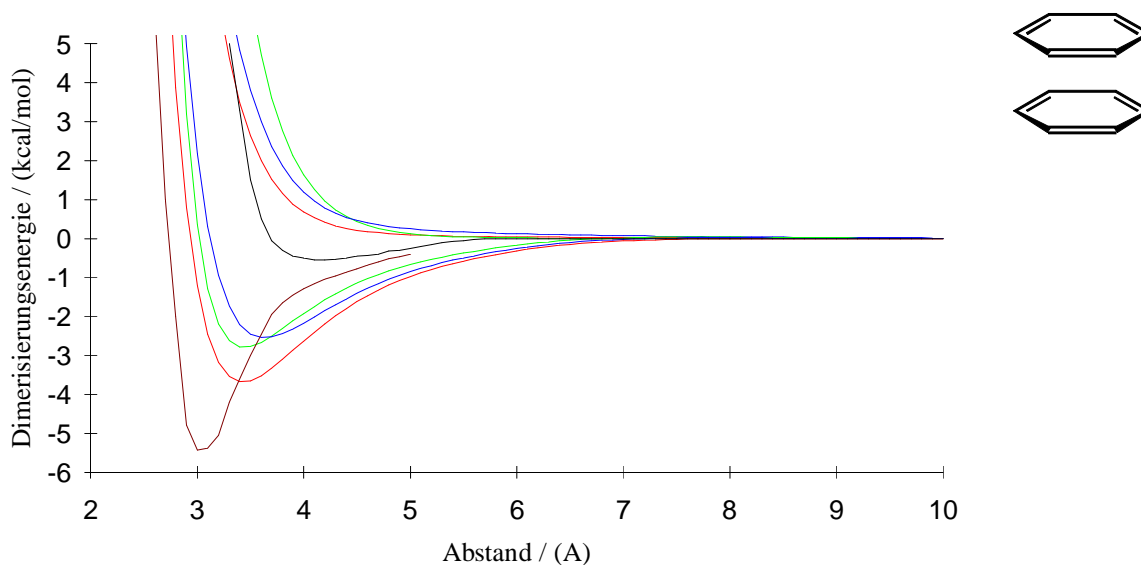
Mit den anderen Kraftfeldverfahren werden im allgemeinen ebenfalls zu hohe Dimerisierungsenergien erhalten. Dagegen folgt aus den Ergebnissen des MNDO- und des AM1-Verfahrens, daß bei dieser Orientierung der Benzolmoleküle zueinander nur geringfügige Wechselwirkungen zu beobachten sind.

Da bei der Parametrisierung des PM3-Verfahrens die Benzol-Benzol-Wechselwirkungen explizit berücksichtigt wurden, sollen diese nun noch genauer behandelt werden. Leider erhält

---

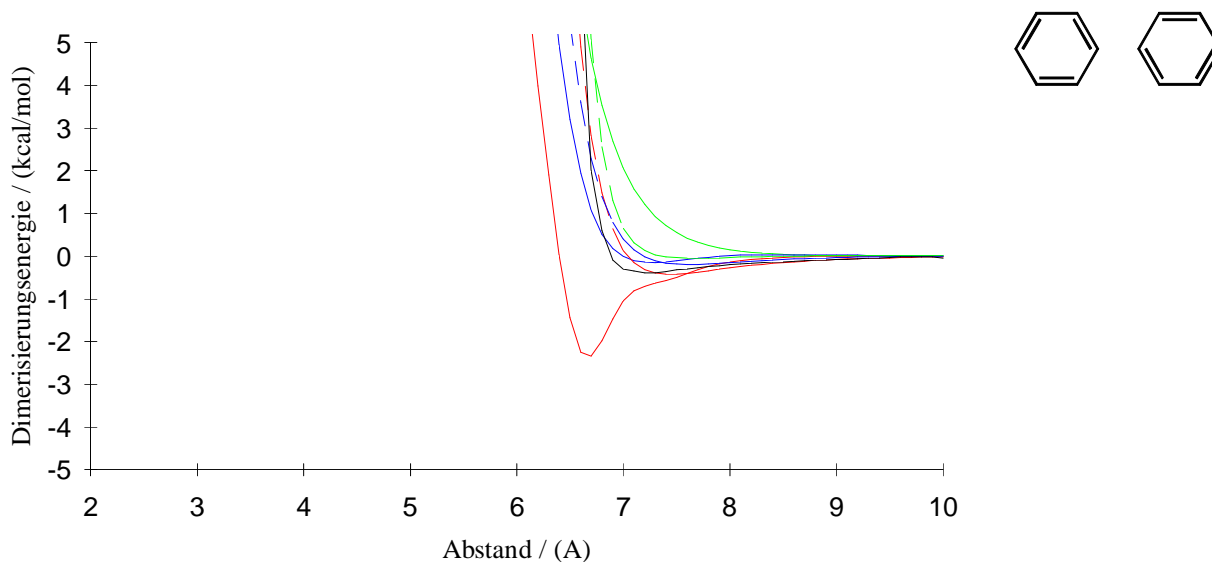
<sup>1</sup> Obwohl anziehende Wechselwirkungsenergien aus thermodynamischer Sicht als negativ definiert sind, werden im folgenden, der allgemein üblichen Sprachkonvention entsprechend, stabilisierende Bindungs- und Wechselwirkungsenergien als positiv und repulsive Bindungs- und Wechselwirkungsenergien dagegen als negativ bezeichnet.

Abbildung 37 : Auftragung der Dimerisierungsenergie in Abhängigkeit von dem Schwerpunktsabstand des Benzol-Dimers in der Sandwich-Geometrie.



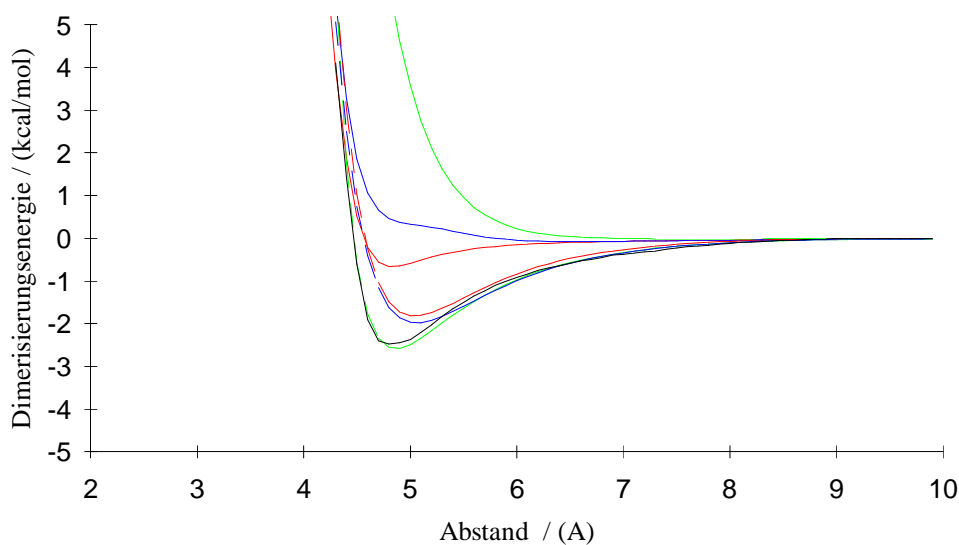
In absteigender Reihenfolge der Minima : -MNDO -AM1 -PM3 -Ab initio-SCF-CI [47]  
-MM3 -MM2 -AMBER -Tripos

Abbildung 38 : Auftragung der Dimerisierungsenergie in Abhängigkeit von dem Schwerpunktsabstand des Benzol-Dimers in planarer Geometrie (Orientierung zueinander Spitze Spitze).



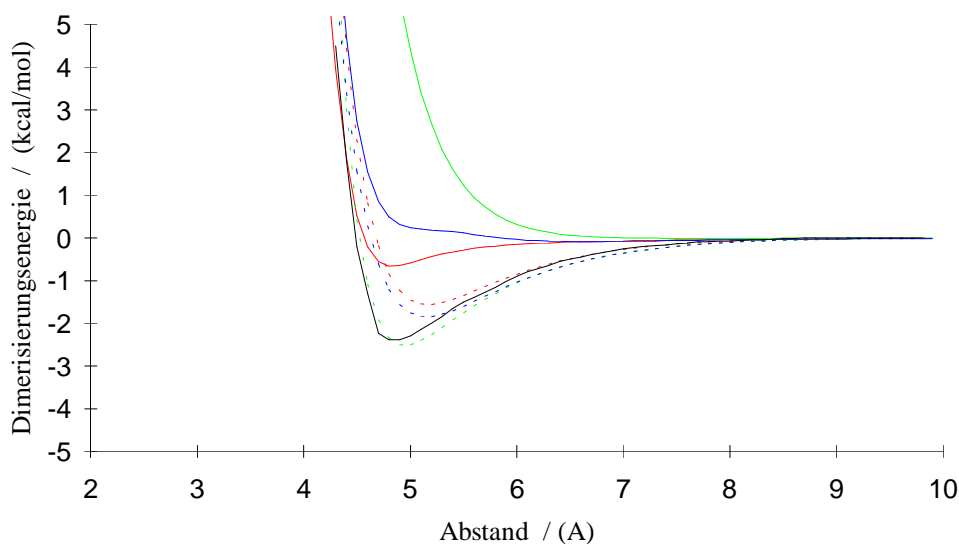
In absteigender Reihenfolge der Minima : -MNDO -MM2 -MM3 -AM1  
-Ab initio-SCF-CI [47] -AMBER -PM3

Abbildung 39 : Auftragung der Dimerisierungsenergie in Abhängigkeit von dem Schwerpunktsabstand des Benzol-Dimers in T-förmiger Geometrie (Orientierung zueinander Kante Seite)



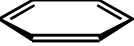
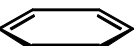


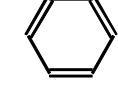

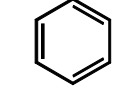

In absteigender Reihenfolge der Minima : -MNDO -AM1 -PM3 -AMBER  
-MM3 -Ab initio-SCF-CI [47] -MM2

Abbildung 40 : Auftragung der Dimerisierungsenergie in Abhängigkeit von dem Schwerpunktsabstand des Benzol-Dimers in T-förmiger Geometrie (Orientierung zueinander Spitze Seite)



In absteigender Reihenfolge der Minima : -MNDO -AM1 -PM3 -AMBER  
-MM3 -Ab initio-SCF-CI [47] -MM2

Tabelle 8 : Vergleich der mit dem PM3- bzw mit Ab initio-Verfahren ermittelten Dimerisierungsenergien

	Geometrietyp	PM3 Energetisches Minimum / (kcal/mol) (Schwerpunktsabstand / (Å))	Ab initio Energetisches Minimum / (kcal/mol) (Schwerpunktsabstand / (Å))	
			[ 46 ]	[ 48 ]
Abb 37		-0.50 (6.0)	-0.5 (3.8)	5.03 (3.6)
				0.66 (5.0)
				0.28 (6.0)
Abb 38		-3.80 (6.0)	-0.5 (7.0)	
Abb 39		-0.25 (6.0)	-2.5 (5.0)	
				
Abb 40		-0.25 (6.0)	-2.5 (5.0)	-0,26 (5.5)
				

man mit dem PM3-Verfahren – für die in den Abbildungen 38-40, sowie in Tabelle 8 aufgeführten Geometrien – keine mit den Ab initio-SCF-CI-Rechnungen [46, 47] vergleichbaren Energien. Während die Sandwich-Geometrie noch akzeptabel wiedergegeben wird, weist die planare Spitze-Spitze-Orientierung auf unverhältnismäßig große Assoziierungsenergien hin. Diese Resultate sind, besonders im Hinblick auf die noch zu besprechenden Wasserstoffbrücken, ziemlich enttäuschend.

Neuere und höherwertige Dichtefunktional-Rechnungen (Becke3P86-Funktional) [48] bestimmen abweichende Energien für die Dimergeometrien. Die Sandwich-Geometrie wird danach rein repulsiv berechnet und ist somit instabil. Parallelverschobene Sandwich-Komplexe werden mit bis zu -0.5 kcal/mol stabilisiert, aber nach der notwendigen BSSE (basis set superposition error)-Korrektur werden sie ebenfalls repulsiv. Die außerordentlich großen Dimerisierungsenergien des T-förmigen Komplexes (Abbildung 40) der Rechnungen aus [46] werden hier nicht reproduziert. Mit -0.29 kcal/mol (-0.79 kcal/mol ohne BSSE-Korrektur ) fallen sie bedeutend niedriger aus.

Die AM1- und MNDO-Verfahren (in der Tabelle nicht aufgeführt) berechnen zu allen 4 Geometrien relativ kleine Wechselwirkungsenergien um -0,1 kcal/mol. Die Macromodel-Version des MM2-Programms gibt die untersuchten Geometrien entsprechend den Ab initio-Rechnungen [46] am besten wieder. Diese Qualität wird von dem Originalprogramm nicht erreicht, auch nicht unter Verwendung speziell angepaßter aufgesetzter Ladungen [49].

Prinzipiell sind zu niedrig berechnete Wechselwirkungsenergien zu bevorzugen, da zu hohe Werte extreme Verzerrungen der Substituenten an aromatischen Systemen, die miteinander wechselwirken, verursachen können.

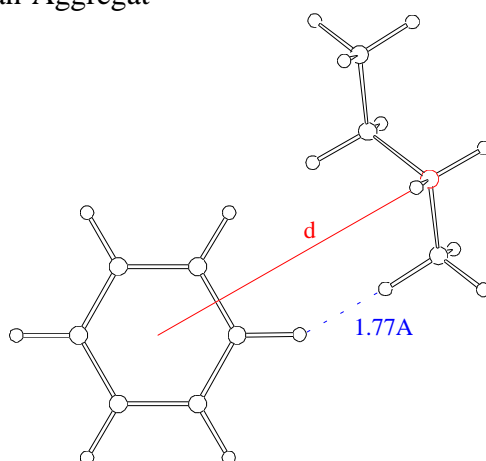
### 3.3.2. Benzol-Alkan-Wechselwirkungen

Tabelle 9 : Benzol-Alkan-Wechselwirkungsenergien am Beispiel des PM3 und des AM1-Verfahrens

Aggregat	Aggregatbildungsenergien PM3 / (kcal/mol)	Aggregatbildungsenergien AM1 / (kcal/mol)
Benzol ...Methan	-1.21	-0.47
Benzol ...Ethan	-3.83	-0.00
Benzol ...Propan	-4.50	-0.52
Benzol ...Butan	-4.56	-0.50
Benzol ...Pentan	-4.62	-0.51

In einer zweiten Testreihe wurden die Wechselwirkungen von Benzol mit verschiedenen Alkanen untersucht. Mit Ausnahme der durch das PM3-Verfahren berechneten Geometrien kam es zu keinen besonderen Auffälligkeiten. Deshalb sollen auch nur die Unterschiede am Beispiel des AM1-Verfahrens gegenübergestellt werden. Unter Berücksichtigung der Vereinfachungen, die sich durch die Symmetrie des Benzolmoleküls ergeben, wurde die Lage des entsprechenden Alkanmolekül relativ zum Benzolring bei verschiedenen Abständen variiert und die jeweiligen Assoziationsenergien für die verschiedenen Anordnungen berechnet. Die einzelnen Orientierungen wurden durch Variation eines in der Benzolebene definierten Winkels und eines senkrecht zur Ebene definierten Winkels, der das Molekül aus der Benzolebenen herausführte, erhalten. Die Winkel wurden in 5°-Schritten variiert. Die auf diese Weise ermittelten Minimumsenergien sind in Tabelle 9 für einige Alkanmoleküle zusammengefaßt.

Abbildung 41 : Benzol-Butan-Aggregat



Die Geometrie für diese überraschend starken Benzol-Alkan-Wechselwirkungen im Rahmen des PM3- Verfahrens wird exemplarisch für das Benzol-Butan-System in Abbildung 41 gezeigt.

Abbildung 42 : Abstandsabhängige Auftragung der Wechselwirkungsenergie für das Benzol-Butan-Aggregat

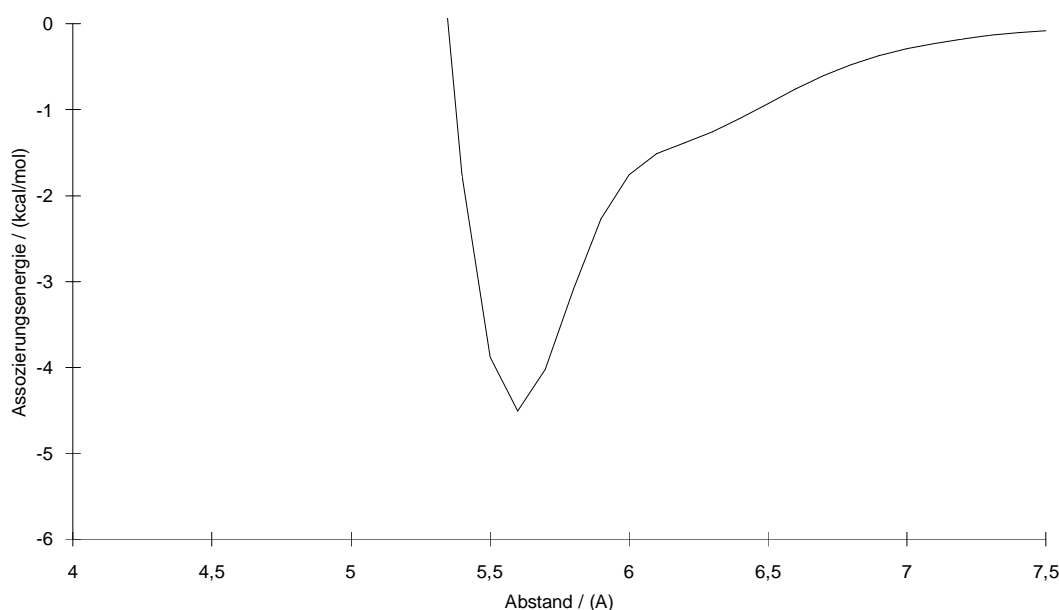


Abbildung 42 zeigt die Änderung der Dimerisierungsenergien, wenn, ausgehend von dem globalen Minimum des Systems, der Abstand  $d$  zwischen den beiden Molekülen variiert wird. ( $d$  ist als Abstand zwischen dem Schwerpunkt des Benzolmoleküls und dem in Abbildung 41 rot gekennzeichneten Kohlenstoffatom definiert.)

Dieser Befund stellt die Brauchbarkeit des PM3-Verfahrens ernsthaft in Frage. Neben noch anderen zu diskutierenden Unzulänglichkeiten wurde deshalb auf das PM3-Verfahren zur Berechnung der Bildungsenergien und Geometrien der an der Enantiomerenüberschußabtrennung beteiligten diastereomeren Komplexe verzichtet.

### 3.3.3. Wasserstoffbrückenbindungen

Eine dritte Testreihe befaßte sich mit der Berechnung einer Reihe von Wasserstoffbrückenbindungen. Die Auswahl erfolgte nach rein praktischen Gesichtspunkten.

Die weitaus meisten der hier untersuchten Enantiomere stellen zur Selbstassoziiierung Carbonyl- oder Alkoholfunktionen zur Verfügung. Die Wechselwirkungen zwischen Monomeren bzw. diastereomeren Komplexen und der stationären Phase werden mit Hilfe des Propylamin modelliert. Fast alle untersuchten Enantiomerenüberschußabtrennungen verwen-

deten Isopropanol als Fließmittel. Deshalb wurden als Modell die Wechselwirkungen des Formaldehyds mit verschiedenen anderen Molekülen berechnet. Hier sollen lediglich die Wasserstoffbrückenbindungen zwischen dem Formaldehyd einerseits und dem Ammoniak, dem Propylamin, dem Formamid und dem Isopropanol andererseits diskutiert werden.

Die Untersuchungen wurden wie folgt durchgeführt. Eine optimierte Geometrie des zu untersuchenden Aggregates war der Ausgangspunkt für eine erste Rasterung des energetischen Konformationsraumes. Der Ursprung eines Kugelkoordinatensystems wurde in das O-Atom des Formaldehyds gelegt, mit der Z-Achse senkrecht zu der Formaldehydebene. Der Ortsvektor definiert sich über den Abstand des Formaldehyd O-Atoms zum anderen Heteroatom der Wasserstoffbrücke. Der Meridian ergibt sich aus der Projektion des Ortsvektors auf die Formaldehydebene und der Carbonylbindung C=O des Formaldehydes. Der Polwinkel ist durch den Ortsvektor und die Z-Achse definiert. Meridian- und Polwinkel wurden in 10°-Schritten bzw. der Abstand der beiden Heteroatome von 2.5 bis 4 Å in 0.1 Å-Schritten geändert. Das auf diese Weise gefundene energetische Minimum wurde nach erneuter Geometrieoptimierung Ausgangspunkt für eine weitere Rasterung. Das hier ermittelte Minimum wurde nach erneuter anschließender Geometrieoptimierung als globales Minimum des betreffenden Aggregats angesehen.

### 3.3.3.1. Semiempirische Verfahren

Aus den Ergebnissen für den Formaldehyd-Ammoniak-Komplex kann man schon einen ersten Trend ableiten, der ebenfalls bei den noch folgenden Beispielen ersichtlich ist. Die Daten zu den Bildungsenthalpien und Geometrien sind in den Tabellen 10a-10c enthalten. Ebenso sind die Bildungsenthalpien der Monomere und die Daten aufgeführt, die zur Berechnung der Komplexbildungsenergien notwendig sind. PM3 berechnet für die Aggregate bedeutend zu hohe Bildungsenthalpien. AM1 und MNDO-M liefern für die Wasserstoffbrücken akzeptable Bildungsenergien, wobei das MNDO-M Verfahren wesentlich stärkere Wechselwirkungen berechnet. AM1 findet als globales Minimum eine chelatartige Geometrie, wie sie auch schon vom H<sub>2</sub>O-Dimer bekannt ist. Die in den Tabellen 10 angegeben eingeklammerten Daten beziehen sich auf das zweitniedrigste, jedoch energetisch sehr ähnliche Minimum, bei dem nur eine Wasserstoffbrückenbindung zwischen dem Formaldehyd und dem Ammoniak auftritt. Die Längen der Wasserstoffbrücken werden von allen Verfahren im Vergleich zu Kristallstruktur<sup>1</sup> - [50] und Ab initio-Daten [51] zu groß berechnet. Bis auf das PM3-Verfahren, finden alle anderen Verfahren eine fast lineare Wasserstoffbrücke, die in der Ebene des Formaldehyds liegt. Die Ausrichtung der Brücken entspricht nicht ganz der Orientierung des einsamen Elektronenpaares am Akzeptoratom.

---

<sup>1</sup> gemittelte Wasserstoffbrückenlängen für eine N-H...O=C Wechselwirkung



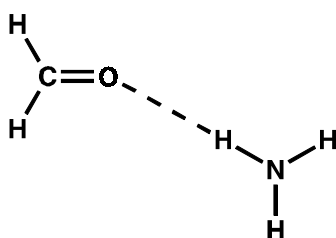


Tabelle 10a : Bildungsenthalpien der Monomeren am globalen Energieminimum

Monomer	experimentell /(kcal/mol) [43]	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
NH <sub>3</sub>	-11.00	-3.10	-7.30	-6.40
CH <sub>2</sub> O	-26.00	-34.10	-31.50	-32.90
Summe Monomere	-37.00	-37.20	-38.80	-39.30

Tabelle 10b : Bildungsenthalpien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

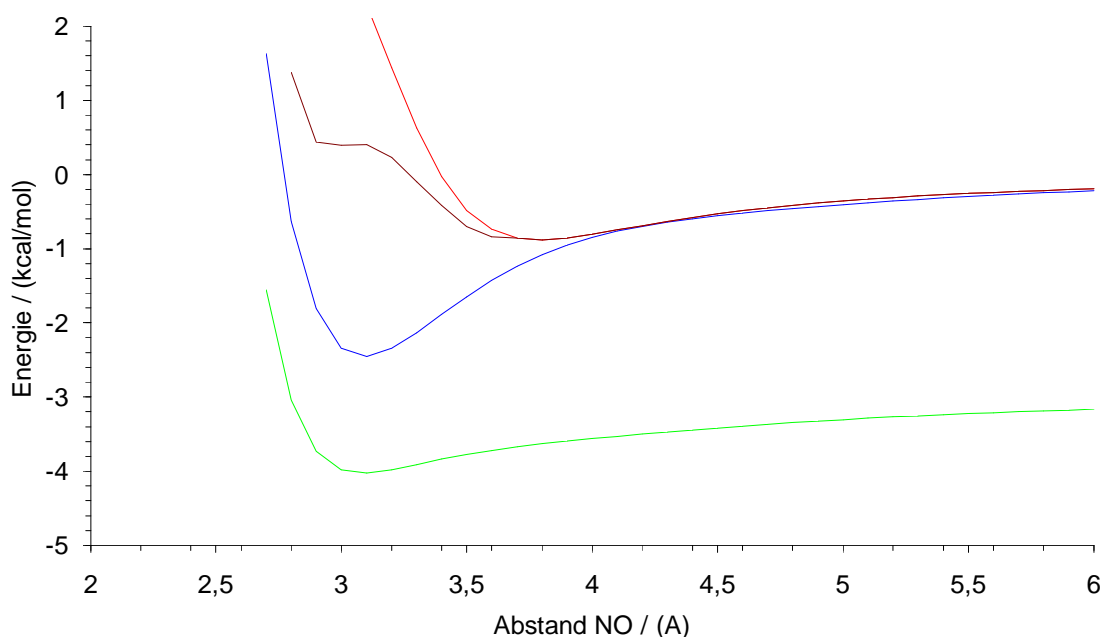
	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
Aggregat CH <sub>2</sub> O...NH <sub>3</sub>	-38.18	-41.53 (-41.47)	-43.50
NH <sub>3</sub>	-3.06	-7.22 (-7.28)	-6.27
CH <sub>2</sub> O	-34.07	-31.49 (-31.48)	-32.88
Summe der Fragmente	-37.13	-38.71 (-38.76)	-39.15
Wechselwirkungsenergie	-1.05	-2.82 (-2.71)	-4.35

Tabelle 10c : Daten zur Wasserstoffbrückeengeometrie

	PM3	AM1	MNDO-M
Abstand O...N / Å	3.54	2.89 (3.10)	3.12
Abstand O...H / Å	2.70 Å	H <sub>1,2</sub> 2.49 (2.22) H <sub>3</sub> 3.16	2.11
Winkel C=O...N / °	100.74	165.56 (89.12)	128.45
Winkel O...H-N / °	141.65	(146.99)	175.53
Torsionswinkel C=O...H-N / °	178.5	(00.00)	0

Im Formaldehyd-Propylamin-System setzt sich der schon angesprochene Trend weiter fort. (siehe Tabelle 11a-c). Wegen des Alkylrestes wird die Wasserstoffbrückenbindung geschwächt. Entsprechend ändern sich die geometrischen Parameter. Die Wasserstoffbrücke bewegt sich aus der Formaldehydebene heraus. Beim PM3-Verfahren deuten sich jedoch Unregelmäßigkeiten in der Wiedergabe des abstandsabhängigen Verhalten an. Wenn man von der globalen Minimumstruktur ausgeht und den Wasserstoffbrückenabstand entsprechend dem vorher definierten Ortsvektor unter Freigabe der restlichen Geometrieparameter variiert, wird ein unerwartetes Zwischenminimum bei 3 Å beobachtet. Wie die noch folgenden Beispiele zeigen ist dies kein zu vernachlässigendes Artefakt, sondern ein schwerwiegendes Problem des verwendeten Programms. Für alle drei Verfahren sind im Diagramm 43 die Änderungen der Wechselwirkungsenergien gegen den Abstand der beiden an der Wasserstoffbrücke beteiligten Heteroatome aufgetragen, wobei die restlichen Geometrieparameter der Minimumstrukturen nicht verändert wurden, sowie der schon angesprochene Schnitt durch die vom PM3-Verfahren berechnete Energiehyperfläche. Das MNDO-M-Verfahren erhält, wie der Graph verdeutlicht, bei großen Abständen viel zu niedrige Wasserstoffbrückenbindungsenergien.

Abbildung 43 : Auftragung der Wasserstoffbrückenbindungsenergien gegen den NO-Abstand im Formaldehyd-Propylamin-Aggregat



In absteigender Reihenfolge der Minima : --PM3 --PM3-Energiehyperflächenschnitt  
--AM1 --MNDO

Bei der Bewegung der globalen Minimumsgeometrien aus der Formaldehydebene heraus bzw. der Drehung des Propylaminmoleküls innerhalb der Formaldehydebene treten keine nennens-

werten Besonderheiten auf. Jedoch ist der allgemein geringe energetische Einfluß dieser Geometrieänderungen bemerkenswert.

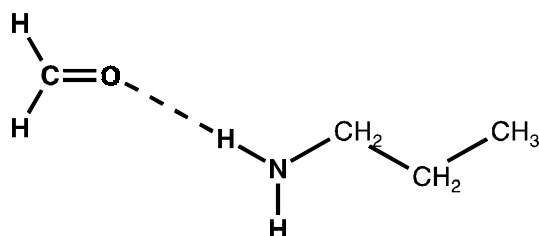


Tabelle 11a : Bildungsenthalpien der Monomeren am globalen Energieminimum

Monomer	experimentell /(kcal/mol) [43]	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2$	-16.80	-17.90	-22.10	-18.2
$\text{CH}_2\text{O}$	-26.00	-34.10	-31.50	-32.9
Summe Monomere	-42.80	-52.00	-53.60	-51.10

Tabelle 11b : Bildungsenthalpien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
Aggregat $\text{CH}_2\text{O} \dots \text{Pa}$	-52.86	-56.19 (-56.05)	-55.20
$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_3\text{NH}_2$	-17.87	-22.06 (-22.08)	-18.05
$\text{CH}_2\text{O}$	-34.08	-31.48 (-31.48)	-32.88
Summe der Fragmente	-51.95	-53.54 (-53.56)	-50.93
Wechselwirkungsenergie	-0.91	-2.65 (-2.49)	-4.27

Tabelle 11c : Daten zur Wasserstoffbrückengeometrie

	PM3	AM1	MNDO-M
Abstand $\text{O} \dots \text{N}$ / Å	3.69	2.91 (3.10)	3.08
Abstand $\text{O} \dots \text{H}$ / Å	2.44	2.49 (2.23)	2.07
Winkel $\text{C}=\text{O} \dots \text{N}$ / °	92.6	94.58 (90.00)	145.71
Winkel $\text{O} \dots \text{H}-\text{N}$ / °	157.43	104.00 (143.64)	169.98
Torsionswinkel $\text{C}=\text{O} \dots \text{H}-\text{N}$ / °	52.9	(-26.00)	79.2

Das dritte hier untersuchte System, nämlich der Wasserstoffbrückenwechselwirkung zwischen dem Formaldehyd und dem Formamid (siehe Tabelle 13a-c), wird häufig in der Literatur [52, 53] als Modell für intra- bzw. intermolekulare Peptid-(Peptid-)Wechselwirkungen herangezogen. Es liegen deshalb für dieses System umfangreiche und hochwertige Ab initio-Rechnungen vor [54, 55]. Den hier als Referenzwert dienenden Rechnungen [54], deren Ergebnisse auch in den Abbildungen 44-46 mit aufgetragen werden, liegt die IMPT-(intermolecular perturbation theory) Methode [56] zu Grunde. Im Rahmen der Störungstheorie 2.Ordnung gibt die Rayleigh-Schrödinger Entwicklung nur den Bereich weitreichender Wechselwirkungen vollständig wieder. Die IMPT-Methode versucht, auch den nahen und mittleren Bereich angemessen zu berücksichtigen. Die in der Tabelle 12 aufgeführten Werte zeigen, daß die von AM1 und MNDO-M gefundenen Minimumsenergien zumindest in der richtigen Größenordnung liegen.

Tabelle 12 : Vergleich der mit verschiedenen Verfahren berechneten Wasserstoffbrückenenergie des Formaldehyd-Formamid Aggregates

	Wechselwirkungsenergie ohne BSSE-Korrektur / (kcal/mol)	Wechselwirkungsenergie mit BSSE-Korrektur / (kcal/mol)
Supermolekül	-3.73	-2.98 (counterpoise)
IMPT 2.Ordnung	-3.26	-3.13
IMPT 2.Ordnung <sup>1</sup>		-6.46
AM1	-3.10	
PM3	-1.37	
MNDO-M	-5.38	

<sup>1</sup>Es werden entsprechend [54] auch für einfach angeregte Zustände der Basissatzfehler korrigiert und die Dispersion- und Charge-Transfer-Korrelation mitberücksichtigt.

Das abstandsabhängige Verhalten der Wechselwirkungsenergien, das aus der Variation des Ortsvektors bei vorgegebener globaler Minimumsgeometrie folgt, ist in Abbildung 44 aufgetragen. Die schon erwähnten Probleme des PM3- und des MNDO-Verfahrens treten wiederum auf. Das PM3-Verfahren zeigt auch hier ein zweites Zwischenminimum, das genau bei dem aus Kristallstrukturdaten und Ab initio-Rechnungen geforderten Abstand für die zu berechnende Wasserstoffbrücke liegt [50, 54]. Die Aggregatbildungssenergien sind auch hier für dieses Verfahren bedeutend zu hoch. Der sich daraus ergebende viel zu flache Kurvenverlauf der energetischen Auftragung zur Variation des Meridians zeigt ein nicht zu erklärendes Zwischenmaximum bei -190°.(siehe Abbildung 45a). Im Gegensatz hierzu weist das AM1-Verfahren keine derartige Feinstruktur auf. In den Abbildungen 45b, 46b wurden die Wechselwirkungsenergien der entsprechenden Graphiken unter a auf die globale Minimumsenergie -6.46 kcal/mol der Ab initio-Rechnung umskaliert. Wie man dem Diagramm 45b entnehmen kann, sind die energetischen Anforderungen, wie sie das AM1-Verfahren für die

Drehung des Formamidmoleküls um das Formaldehydmolekül im Bereich von  $-210^\circ$  bis  $-130^\circ$  berechnet, denen aus der Ab initio-Rechnung vergleichbar. Die MNDO-M-Berechnungen zeigen für diese Auftragung ein viel zu enges Minimum. Die Änderung der Energie mit dem Polwinkels ist wenig aussagekräftig (Abbildung 46a), aber die Umskalierung der semiempirischen Werte deutet auf ein für alle vier Verfahren gleichwertiges Verhalten hin (Abbildung 46b).

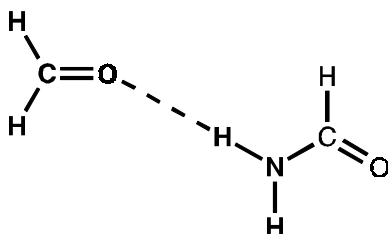


Tabelle 13a : Bildungsenthalpien der Monomeren am globalen Energieminimum

Monomer	experimentell /(kcal/mol) [43]	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
NH <sub>2</sub> CHO	-44.50	-41.80	-44.70	-39.4
CH <sub>2</sub> O	-26.00	-34.10	-31.50	-32.9
Summe Monomere	-60.50	-75.90	-76.20	-72.30

Tabelle 13b : Bildungsenthalpien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
Aggregat CH <sub>2</sub> O...NH <sub>3</sub>	-75.95	-79.33	-77.52
NH <sub>2</sub> CHO	-40.5	-44.74	-39.27
CH <sub>2</sub> O	-34.08	-31.49	32.87
Summe der Fragmente	-4.58	-76.23	-72.14
Wechselwirkungsenergie	-1.37	-3.10	-5.38

Tabelle 13c : Daten zur Wasserstoffbrückengeometrie

	PM3	AM1	MNDO-M
Abstand O...N / Å	3.50	3.14	3.00
Abstand O...H / Å	2.55	2.18	2.03
Winkel C=O...N / °	169.90	159.26	170.00
Winkel O...H-N / °	162.31	163.7	162.04
Torsionswinkel C=O...H-N / °	32.60	5	18.01
Torsionswinkel C=O...N-C / °	178.90	179.9	179.8

Abbildung 44 : Auftragung der Wasserstoffbrückenbindungsenergien gegen den NO-Abstand im Formamid-Formaldehyd-Aggregat

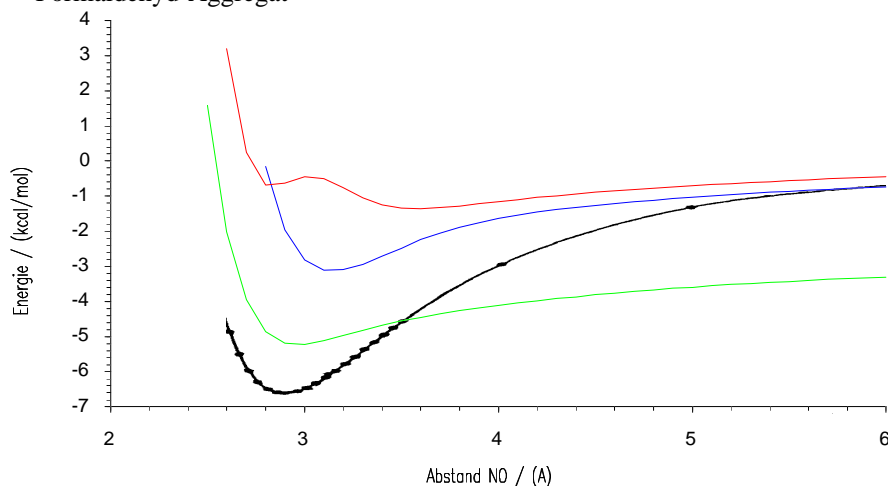


Abbildung 45a : Auftragung der Wasserstoffbrückenbindungsenergien gegen die Änderung des Meridianwinkels im Formamid-Formaldehyd-Aggregat

Abbildung 45b : Umskalierung der Wechselwirkungsenergien auf die globale Minimumsenergie der Ab initio-Rechnung ausgehend von Abb. 45a (Y-Achse nur für die Ab initio-Rechnung gültig)

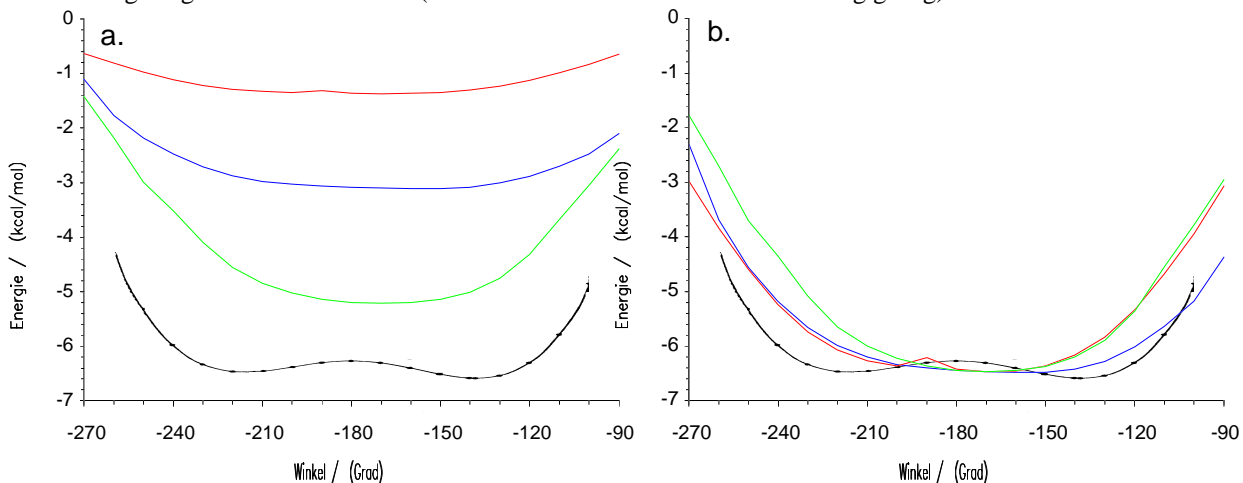
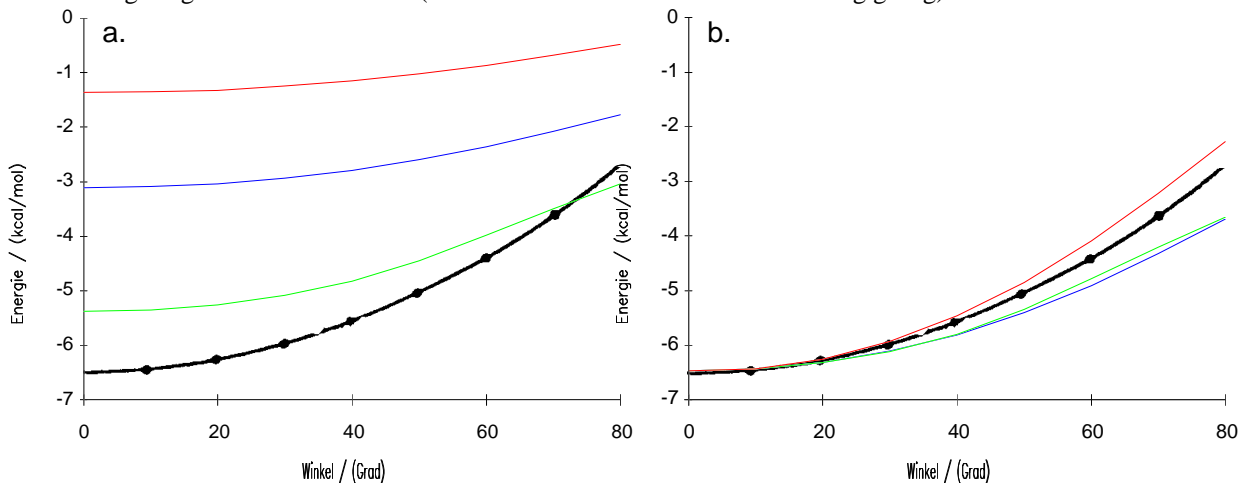


Abbildung 46a : Auftragung der Wasserstoffbrückenbindungsenergien gegen die Änderung des Polwinkels im Formamid-Formaldehyd-Aggregat

Abbildung 46b : Umskalierung der Wechselwirkungsenergien auf die globale Minimumsenergie der Ab initio-Rechnung ausgehend von Abb. 46a (Y-Achse nur für die Ab initio-Rechnung gültig)



Legende zu Abb 44-46 :

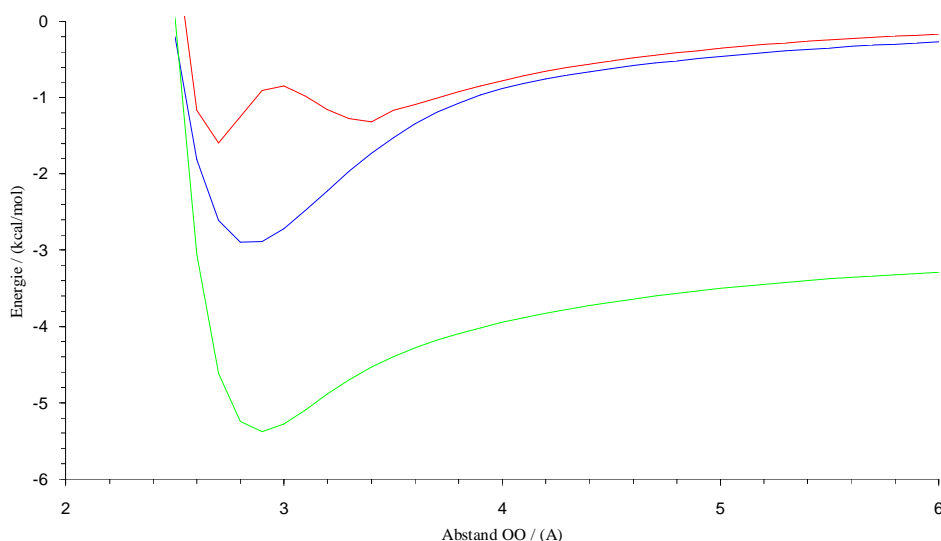
--PM3

-- Ab initio [47]

--AM1 --MNDO

In dem vierten System wird die Wechselwirkung zwischen dem Formaldehyd und dem Isopropanol untersucht (siehe Tabelle 14a-c). Auch hier sind keine großen Änderungen zu den vorherigen Beispielen zu beobachten. Wie von den Kristallstrukturdaten zu erwarten ist [50], wird die Wasserstoffbrücke im Gegensatz zum Formaldehyd-Propylamin-System verstärkt. Die Längen sind daher verkürzt.

Abbildung 47 : Auftragung der Wasserstoffbrückenbindungsenergien gegen den OO-Abstand im Formaldehyd-Isopropanol-Aggregat



Im Falle des PM3-Verfahren ist die Längenverkürzung nicht so drastisch, wie die Tabellen 14b und 14c es vorgeben. Das Nebenminimum der vorherigen Systeme wird hier zum globalen Minimum.

Das unzuverlässige Verhalten des PM3-Verfahrens besteht auch bei hier nicht aufgeführten Wechselwirkungssystemen. Neben den schon beschriebenen Unzulänglichkeiten des PM3-Verfahrens wurde aus diesem Grunde auf seine weitere Verwendung zur Berechnung zwischenmolekularer Wechselwirkungen verzichtet. Inwieweit sich diese Artefakte des Programms auf die Berechnung molekularer Eigenschaften auswirken, kann nicht abgeschätzt werden, zumal andere Wechselwirkungstypen (siehe Kapitel 3.3.1. und 3.3.2.) wesentlich stärker bewertet werden. Zum Beispiel wird die Stabilität der Formaldehyd-Amin-Wasserstoffbrücke um die Hälfte geringer berechnet als die der Benzol-Dimere. Voruntersuchungen zeigen jedoch, daß diese unrealistischen Ergebnisse in direktem Zusammenhang mit der Parametrisierung und der Berechnung der Core-Core-Abstoßung stehen. Das MNDO-M-Verfahren zeichnet sich durch seine unflexible Behandlung der meridialen Energieabhängigkeit der Wasserstoffbrückenbindungen aus. Seine extrem falschen Wasserstoffbrückenbindungsenergien bei großen Abständen erwiesen sich bei später durchgeführten Rechnungen als fatal. Deshalb wird dieses Verfahren,

obwohl es die Wasserstoffbrückenminimumsenergien besser wiedergibt als das AM1-Verfahren, in dieser Arbeit nicht weiter berücksichtigt. Trotz der ersichtlichen Schwächen, nämlich der zu hohen Wasserstoffbrückenenergien, den zu großen Wasserstoffbrückenbindungslängen und dem fast indifferentem Verhalten gegenüber  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen scheint das AM1-Programm von allen das geeignetste semiempirische Verfahren zu sein.

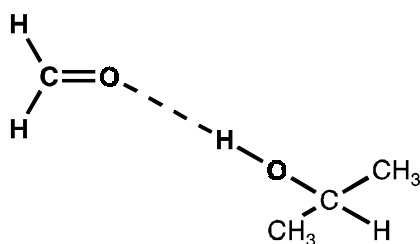


Tabelle 14a : Bildungsenthalpien der Monomeren am globalen Energieminimum

Monomer	experimentell /(kcal/mol) [43]	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
HC(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> OH	-65.10	-64.00	-68.00	-65.40
CH <sub>2</sub> O	-26.00	-34.1	-31.50	-32.90
Summe Monomere	-86.10	-98.10	-99.50	-98.30

Tabelle 14b : Bildungsenthalpien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

	PM3 /(kcal/mol)	AM1 /(kcal/mol)	MNDO-M /(kcal/mol)
Aggregat CH <sub>2</sub> O...NH <sub>3</sub>	-100.19	-102.65	-103.70
HC(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> OH	-63.87	-68.03	-64.60
CH <sub>2</sub> O	-34.06	-31.48	-32.88
Summe der Fragmente	-97.93	-99.51	-97.48
Wechselwirkungsenergie	-2.26	-3.14	-6.22

Tabelle 14c : Daten zur Wasserstoffbrückengeometrie

	PM3	AM1	MNDO-M
Abstand O...N / Å	2.77	2.90	2.90
Abstand O...H / Å	1.83	2.22	1.92
Winkel C=O...N / °	115.02	81.69	144.88
Winkel O...H-N / °	-166.64	126.72	170.63
Torsionswinkel C=O...H-N / °	-7.9	-1.4	-13.3



### 3.3.3.2. Kraftfeldverfahren

Die Ergebnisse der 3 Kraftfeldverfahren sollen hier nur kurz umrissen werden. Es wurden nach dem vorgestellten Schema einerseits Rechnungen mit den Macromodel-Versionen der Kraftfelder durchgeführt, andererseits mit aufgesetzten AM1-Ladungen (mL). Diese Partialladungen wurden den globalen AM1-Minimumsstrukturen der entsprechenden Systemfragmente entnommen. Sie fielen vom Wert her meist geringer aus als die parametrisierten Ladungen. Da weitreichende Wechselwirkungen lediglich durch die Partialladungen beschrieben werden, ist es nicht verwunderlich, daß Rechnungen mit aufgesetzten AM1-Ladungen den Energiegewinn durch Bildung einer Wasserstoffbrückenbindung bedeutend geringer bewerten. Da keine Auffälligkeiten in den Resultaten der Rasterung zu entdecken waren, werden hier nur die Ergebnisse der gefundenen Minimumsgeometrien vorgestellt (zusammengefaßt in den Tabellen 15-17).

Die Reihenfolge der Wasserstoffbrückenstärke der vorgestellten Komplexe bleibt die gleiche wie bei den semiempirischen Rechnungen. Die Kraftfeldverfahren berechnen jedoch die Abstände der beiden Wasserstoffbrückenheteroatome wesentlich kürzer. Sie entsprechen somit mehr den aus Kristallstrukturanalysen gewonnenen Werten von 2.8 bis 2.9 Å [50].

Tabelle 15a : CH<sub>2</sub>O...NH<sub>3</sub> Bildungsenergien der Monomeren am globalen Energieminimum

	Amber /(kcal/mol)	Amber mL /(kcal/mol)	MM2 /(kcal/mol)	MM2 mL /(kcal/mol)	MM3 /(kcal/mol)	MM3 mL /(kcal/mol)
CH <sub>2</sub> O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.26
NH <sub>3</sub>	0.00	0.00	0.67	0.67	0.00	0.00

Tabelle 15b : Bildungsenergien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

	Amber /(kcal/mol)	Amber mL /(kcal/mol)	MM2 /(kcal/mol)	MM2 mL /(kcal/mol)	MM3 /(kcal/mol)	MM3 mL /(kcal/mol)
Aggregat	-5.3	-1.41	-1.57	-0.41	-1.97	-0.62
NH <sub>3</sub>	0.16	0.02	0.68	0.67	0.00	0.00
CH <sub>2</sub> O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.26
Summe der Fragmente	0.16	0.02	0.68	0.67	0.26	0.26
Wechselwirkungsenergie	-5.14	-1.43	-2.25	-1.08	-2.23	-0.88

Tabelle 15c : Daten zur Wasserstoffbrückengeometrie

	Amber	Amber mL	MM2	MM2 mL	MM3	MM3 mL
O...N / Å	2.76	3.00	2.91	3.09	2.96	3.12
O...H / Å	1.74	1.99	1.96	2.1	1.95	2.12
C=O...N / °	130	115.2	166.6	110	161.6	153.2
C...H-N / °	178.7	177.2	154.2	163.3	168.8	170.6
C=O...H-N / °	179.6	0	179.9	1.8	180	179.9

Tabelle 16a : CH<sub>2</sub>O...CH<sub>3</sub>(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> Bildungsenergien der Monomere am globalen Energieminimum

	Amber /(kcal/mol)	Amber mL /(kcal/mol)	MM2 /(kcal/mol)	MM2 mL /(kcal/mol)	MM3 /(kcal/mol)	MM3 mL /(kcal/mol)
CH <sub>2</sub> O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.26
CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	1.16	2.13	1.99	3.58	1.94	3.54

Tabelle 16b : Bildungsenergien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

	Amber /(kcal/mol)	Amber mL /(kcal/mol)	MM2 /(kcal/mol)	MM2 mL /(kcal/mol)	MM3 /(kcal/mol)	MM3 mL /(kcal/mol)
Aggregat	-5.52	0.18	-1.15	1.71	-0.62	2.50
CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	1.30	2.14	2.01	3.59	1.95	3.55
CH <sub>2</sub> O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.26
Summe der Fragmente	1.30	2.14	2.01	3.59	2.21	3.81
Wechselwirkungsenergie	-6.82	-1.96	-3.16	-1.88	-2.83	-1.31

Tabelle 16c : Daten zur Wasserstoffbrückegeometrie

	Amber	Amber mL	MM2	MM2 mL	MM3	MM3 mL
O...N / Å	2.74	2.98	2.94	3.07	2.94	3.14
O...H / Å	1.72	1.97	1.94	2.01	1.93	2.14
C=O...N / °	147.7	116.0	124.2	116.2	151.4	124.4
C...H-N / °	175.2	170.9	162.9	162.0	168.6	165.3
C=O...H-N / °	124.0	38.2	28.3	4.7	90.6	9.3

Tabelle 17a : CH<sub>2</sub>O...NH<sub>2</sub>CHO Bildungsenergien der Monomere am globalen Energieminimum

	Amber /(kcal/mol)	Amber mL /(kcal/mol)	MM2 /(kcal/mol)	MM2 mL /(kcal/mol)	MM3 /(kcal/mol)	MM3 mL /(kcal/mol)
CH <sub>2</sub> O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.26
NH <sub>2</sub> CHO	-3.87	-1.11	-8.87	-2.34	-2.85	-2.41

Tabelle 17b : Bildungsenergien der Aggregate, Fragmente und Wechselwirkungsenergien

	Amber /(kcal/mol)	Amber mL /(kcal/mol)	MM2 /(kcal/mol)	MM2 mL /(kcal/mol)	MM3 /(kcal/mol)	MM3 mL /(kcal/mol)
Aggregat	-12.23	-4.51	-13.72	-4.89	-6.82	-4.53
NH <sub>2</sub> CHO	-3.76	-1.09	-8.86	-2.33	-2.84	-2.41
CH <sub>2</sub> O	0.00	0.00	0.00	0.00	0.26	0.26
Summe der Fragmente	-3.76	-1.09	-8.86	-2.33	-2.58	-2.15
Wechselwirkungsenergie	-8.47	-3.42	-4.86	-2.56	-4.24	-2.38

Tabelle 17c : Daten zur Wasserstoffbrückegeometrie

	Amber	Amber mL	MM2	MM2 mL	MM3	MM3 mL
O...N / Å	2.67	2.83	2.86	2.93	2.90	2.97
O...H / Å	1.68	1.82	1.84	1.99	1.86	1.97
C=O...N / °	177.4	1.77	173.4	177	175.4	178.4
C...H-N / °	176.2	171.6	170.7	157.7	180.0	163.6
C=O...H-N / °	179.6	179.9	0.00	177.2	12.3	179.7
H-C=O N / °	89.6	90.2	180.0	85.7	-89.9	89.5

In allen Berechnungen überschätzt das AMBER-Verfahren die Stärke der Wasserstoffbrückenbindung. Dahingegen erhöht die durch aufgesetzte AM1-Ladungen eingeführte Korrektur die Wasserstoffbrückenbindungsenergie zu stark. Bei den Allinger-Kraftfeldern führt dies zu einer Halbierung der Energien. Auch erkennt man bei diesen beiden Kraftfeldern ihre enge Verwandtschaft, die zu sehr ähnlichen Geometrien und Energien führt. Auffallend ist, daß alle Kraftfelder, bis auf das MM2-Verfahren ohne aufgesetzte Ladungen für den Formamid-Formaldehyd-Komplex keine planare Geometrie finden, sondern eine zueinander senkrechte Orientierung der beiden planaren Moleküle bevorzugen. Dies ist sehr verwunderlich im Falle des AMBER-Verfahrens, da es für die Berechnung von Peptiden konzipiert wurde.

Es ist sehr schwierig, die Qualität der Wiedergabe der Wasserstoffbrückenwechselwirkungen durch die verschiedenen Kraftfelder zu bewerten. Ohne Zweifel wird aber die Wasserstoffbrückenbindung durch aufgesetzte AM1-Ladungen energetisch falsch beschrieben. Mit dem reinen AMBER-Verfahren wird dagegen die Stabilisierung durch die Wasserstoffbrückenbindungen gewaltig überschätzt.

Die Bevorzugung der nicht planaren Geometrien in Falle der Formamid-Formaldehyd-Komplexe führt bei den Rechnungen zur Enantiomerenüberschußabtrennung der Aminosäureester nicht zu stabilen Dimeren.

Im Vergleich mit den Benzol-Benzol-Wechselwirkungen geben das MM2- und MM3-Verfahren ohne aufgesetzte Ladungen die Wasserstoffbrückenbindungen fast gleich stark wieder. Dieses unausgewogene Verhältnis der Wechselwirkungsenergien kann auch nicht durch aufgesetzte AM1-Ladungen behoben werden, wie es die entsprechenden Wasserstoffbrückenbindungsenergien zeigen. Um die hieraus resultierenden Probleme zu verdeutlichen, werden am Beispiel der Rechnungen zu den experimentellen Enantiomerenüberschußabtrennungen des 1,1'-Bi-2-Naphthol auch Ergebnisse der verschiedenen Kraftfeldverfahren mitdiskutiert. Im Rahmen dieses speziellen Anwendungsbeispiels weisen das AMBER- und das MM2-Verfahren aber auch noch andere Unzulänglichkeiten auf.

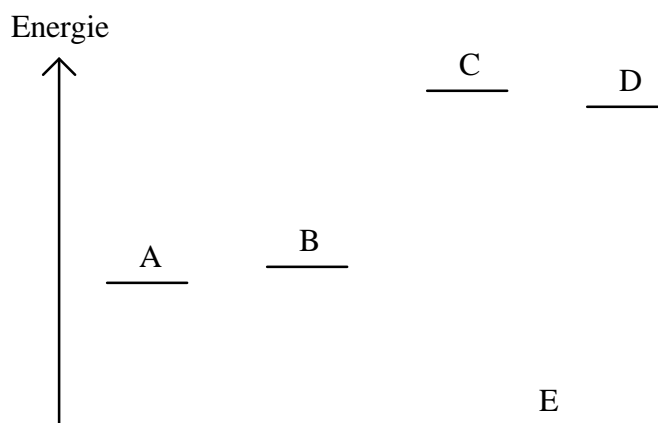
Um Mißverständnissen vorzubeugen, muß darauf hingewiesen werden, daß die hier verwendeten Kraftfeldverfahren zur Berechnung von molekularen Eigenschaften parametrisiert wurden. Mit Hilfe der diskutierten Testrechnungen sollte überprüft werden, ob sich der Anwendungsbereich der Kraftfeldverfahren zwanglos auf die Berechnung zwischenmolekularer Wechselwirkungsenergien und Geometrien erweitern läßt.

## 4. Rechnungen und Simulationen zu experimentell gemessenen Chromatogrammen

### 4.0. Definitionen zur Berechnung von Wechselwirkungsenergien

In diesem Abschnitt soll kurz erläutert werden, wie die in den folgenden Kapiteln verwendeten Wechselwirkungsenergien definiert sind.

Abbildung 48 : Schema zur Definition der Wechselwirkungsenergien



Angenommen zwei Moleküle befinden sich in ihrer globalen Minimumsgeometrie und werden durch die in Abbildung 48 als A und B bezeichneten Zustände beschrieben. Wenn sie ein Aggregat bilden, verändern sie meistens ihre Konformationen, um sich den jeweiligen Wechselwirkungsbedingungen besser anpassen zu können. Sie müssen also die instabileren Konformationen D und C einnehmen. Das Aggregat der beiden Moleküle hat, da es auf Grund der Wechselwirkungen stabilisiert wird, die Energie E.

Es gibt nun zwei Arten, diese Wechselwirkungen zu beschreiben:

1. Die Wechselwirkungsenergie wird auf die globalen Minimumsenergien bezogen  
Wechselwirkungsenergie bezogen auf die Minimumsenergie  $W_M = E - (A + B)$
2. Die Wechselwirkungsenergie wird aus den Konformationsenergien der verschiedenen einzelnen Moleküle im Aggregat ermittelt.

Wechselwirkungsenergie bezogen auf das Aggregat  $W_A = E - (C + D)$

Desweiteren werden im Kontext dieser Arbeit folgende Definition und Abkürzungen benutzt :

Die globale Minimumsenergie eines Moleküls bzw. Aggregates wird mit H bezeichnet

Die Energie eines fiktiven Aggregates bzw. einer Substruktur des Aggregates bestehend aus den einzelnen Molekülen in ihren Minimumsgeometrien wird  $H(\text{Aufzählung der Bestandteile})_M$  genannt.

Die Energie eines Moleküls bzw. einer Substruktur, wie sie im Aggregat enthalten ist, wird als  $H_A$  bzw.  $H(\text{Aufzählung der Substrukturbestandteile})_A$  definiert.

Desweiteren werden auf die Minimumsenergien bezogene Wechselwirkungsenergien von Substrukturen, wie sie im Aggregat enthalten sind, als  $W(\text{Aufzählung der Substrukturbestandteile})_M$  bezeichnet. Besteht die Substruktur eines Aggregates aus nur einem Molekül wird die entsprechende Energiedifferenz zwischen der globalen Minimumskonformation und der aktuellen Konformation im Aggregat ebenfalls mit  $W(\text{Molekül})_M$  abgekürzt.

Analoges gilt für die auf das Aggregat bezogenen Wechselwirkungsenergien  $W(\text{Aufzählung der Substrukturbestandteile})_A$  von Substrukturen.

In Tabellen und Abbildungen weisen die den Namen der Komplexe hinzugefügten Abkürzungen ss bzw. sr auf ein homochirales bzw. ein heterochirales Aggregat hin.

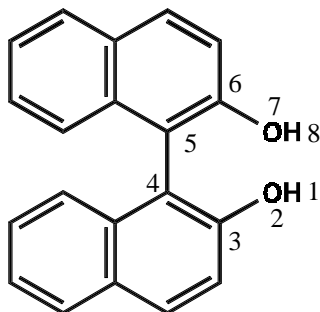
Tabellen bzw. Abbildungen, deren Numerierung ein A, B oder C vorangestellt ist, sind in dem entsprechenden Anhang zu finden.

Zur graphischen Darstellung der Molekülgeometrien wurde das SCHAKAL-Programm [85] verwendet. Die Farbgebung der einzelnen Elemente ergibt sich aus der 'default'-Einstellung dieses Programms, das den Atomen folgende Farben zuweist:

C-Atom	schwarz
H-Atom	schwarz
O-Atom	rot
N-Atom	grün
F-Atom	grün
Cl-Atom	schwarz

#### 4.1.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung des 1,1'-Bi-2-naphthols

Abbildung 49 :



Die Enantiomerenüberschußabtrennung des 1,1' -Bi-2-naphthols ist das am besten untersuchte System im Arbeitskreis Matusch. Ergebnisse zur Trennung von Enantiomerengemischen dieser Substanz sind in den Promotionsarbeiten von Coors [5] und Heinzerling [4] dokumentiert. Das 1,1' -Bi-2-naphthol diente für viele Untersuchungen als Modellschubstanz wie zum Beispiel für die Temperaturabhängigkeit der Trennung, den Einfluß des Fließmittels, und der Flußrate im chromatographischen System u.s.w..

Hier sollen zunächst Chromatogrammsimulationen der Enantiomerenüberschußabtrennung des 1,1' -Bi-2-naphthols an der Aminphase aus der Dissertation von Coors [5] diskutiert werden. Doch zuvor werden aber an diesem Beispiel die Vorgehensweise bei der Simulation von experimentellen Chromatogrammen und die bei der Parameteranpassung auftretenden Probleme vorgestellt. Für die Anpassung wurden lediglich die Chromatogramme von zwei Aufgaben, nämlich die der reinen Enantiomer- und der Racemataufgabe, herangezogen. Alle anderen Simulationen von experimentellen Chromatogrammen, die man durch die eigentlichen Enantiomerenüberschußabtrennungen der nichtracemischen Mischungen über den gesamten Aufgabemengenbereich erhalten hatte, wurden mit dem so bestimmten Parametersatz berechnet. Auf den numerischen Wert der Retentionszeit  $R_{t,max}$  bezogen, wurde die abfallende Flanke des experimentellen Chromatogramms mit Hilfe von 4 Exponentialfunktionen angefüttet, während der steile Anstieg zum Retentionsmaximum durch eine Gerade approximiert wurde. Mit der Berechnung der Fläche unter der gemessenen Chromatogrammfunktion kann auch eine Skalierung bezüglich der Aufgabemenge erfolgen, wodurch der direkte Vergleich zwischen berechnetem und experimentellem Chromatogramm möglich wird. Durch Variation der Simulationsparameter wurde nun versucht, die bestmögliche Übereinstimmung dieser beiden Funktionen zu erhalten. Parameter, die vom chromatographischen System abhängen, wie die Totzeit oder das Säulenvolumen, sind natürlich hiervon ausgenommen, so daß lediglich die Kapazitätsfaktoren und die entsprechenden Gleichgewichtskonstanten zur Verfügung stehen. Abbildung 50 und 51 zeigen die so berechneten Graphen. Der Tabelle 18 kann man die hierbei verwendeten Parameter

entnehmen. Da zum Teil die numerischen und graphisch dargestellten Retentionszeitmaxima im experimentellen Chromatogrammausdruck nicht übereinstimmen, werden im folgenden alle Parameteranpassungen unter Beibehaltung der Kurvenform auf die numerischen angegebenen Chromatogrammwerte bezogen (falls vorhanden). In vielen Fällen wurden auch Nichtlinearitäten der Zeitachse im experimentellen Ausdruck beobachtet, die die Auswertung erschwerten.

Abbildung 50 : Vergleich des angepaßten Chromatogramms der reinen Enantiomeraufgabe mit dem Simulationschromatogramm

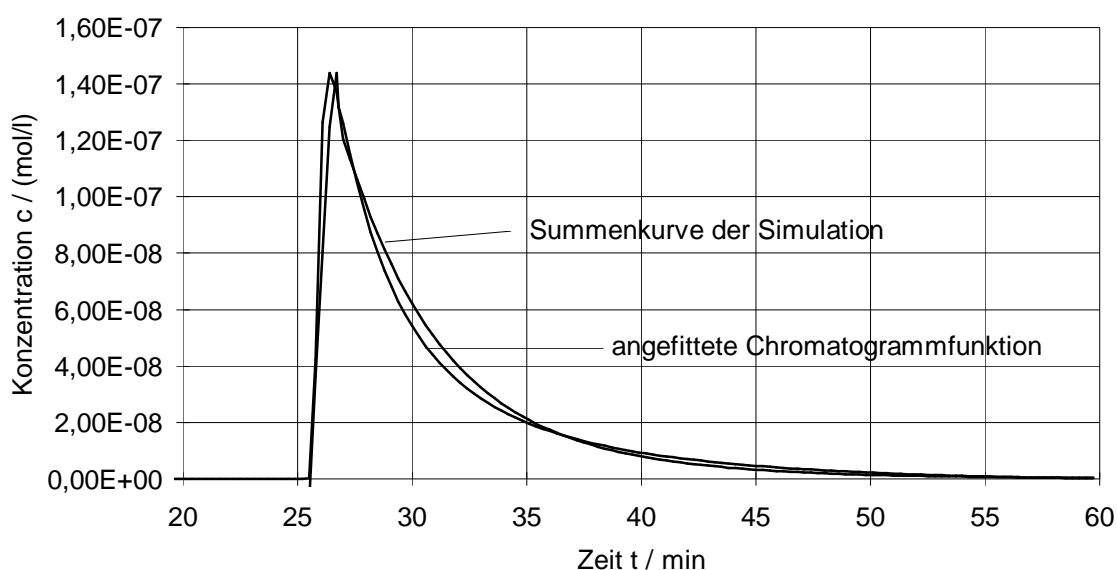


Abbildung 51 : Vergleich des angepaßten Racematchromatogramms mit dem Simulationschromatogramm

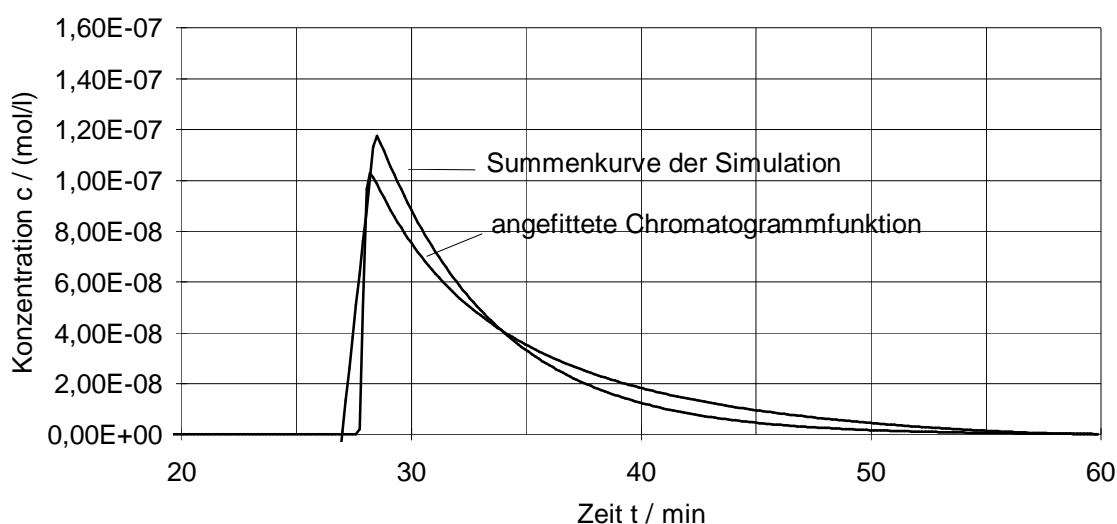


Tabelle 18 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten für das 1,1'-Bi-2-naphthol

Aufgabe- menge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*200	100	26.42		7.81		3		26.41		7.80		3	
*200	0		28.39		8.46	3			28.40		8.47	3	
200	34	27.92	30.78	8.31	9.26	3	1.11	27.63	30.50	8.21	9.16	3	1.16
200	86	26.02	36.74	7.67	11.24	3	1.46	26.63	38.5	7.88	11.83	3	1.50
100	33	30	33	9	10	3	1.11	31.15	34	9.38	10.33	3	1.10
100	46	31.82	39.19	9.61	12.06	3	1.26	31.15	37	9.38	11.33	3	1.21
100	60	30.76	36.24	9.25	11.08	3	1.2	30.43	37.5	9.14	11.5	3	1.26
100	77	30.52	39.32	9.17	12.11	3	1.32	29.99	41	9	12.66	3	1.41
100	86	30.24	41.85	9.08	12.95	3	1.46	29.86	46	8.95	14.33	3	1.61
100	99	30.00	52	9	16.33	3	1.9	29.50	55	8.83	17.33	3	1.96

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	5.7667	$k_{(RS)}$ :	5.7667
$k_{(R)}$ :	18.0		
$Km_{(RR)}$ :	4.1 10 <sup>4</sup> l/mol	$Km_{(RS)}$ :	2.0 10 <sup>4</sup> l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	500

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden



Mit den so ermittelten Kapazitätsfaktoren und Gleichgewichtskonstanten wurden dann die entsprechenden Enantiomerenüberschußabtrennungschromatogramme berechnet.

Der graphische Vergleich der in Tabelle 18 aufgeführten Chromatogramme ist in den Abbildungen A1-A10 wiedergegeben. Die ihnen jeweils zu Grunde liegenden Aufgabemengen sowie die aus den Chromatogrammen folgenden Kapazitätsfaktoren und relativen Retentionen sind am Ende von Tabelle 18 angegeben.

Abbildung 52 : Auftragung der experimentellen [5] und simulierten Retentionszeiten gegen die optische Reinheit (Aufgabemenge 100 $\mu$ g)

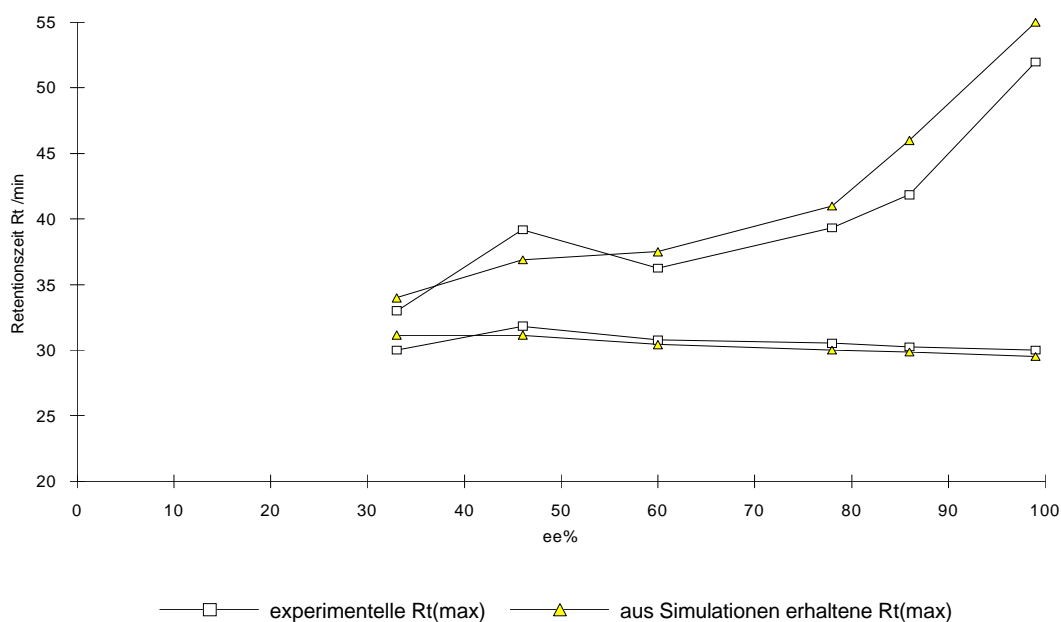
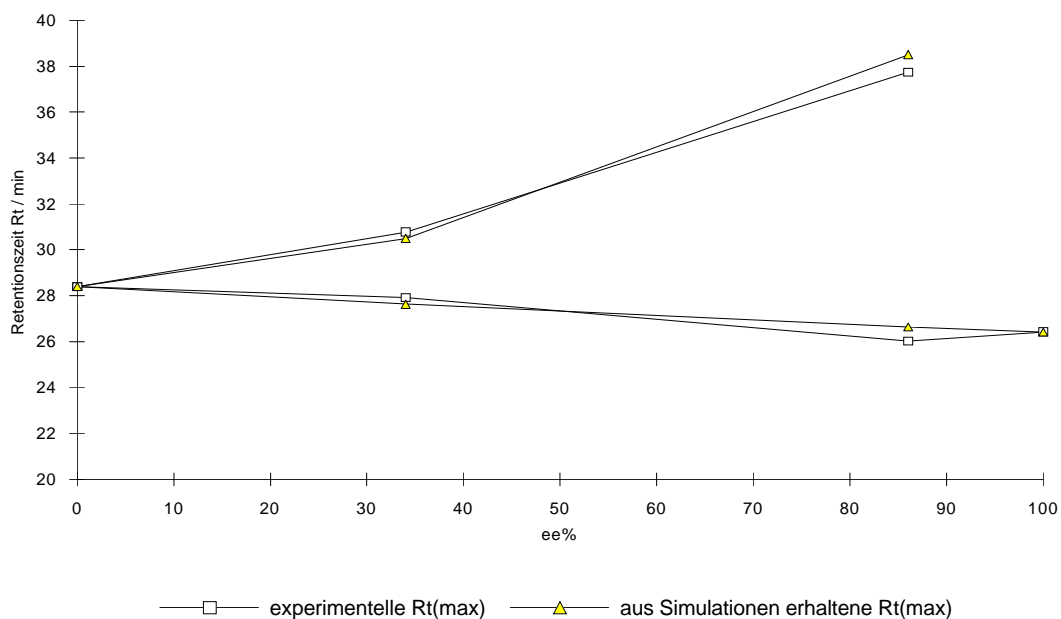


Abbildung 53 : Auftragung der experimentellen [5] und simulierten Retentionszeiten gegen die optische Reinheit (Aufgabemenge 200 $\mu$ g)



Sieht man von den generellen Schwierigkeiten ab, eine Simulationskurve an einen Schreiberausdruck anzupassen, so ist, trotz der theoretischen Schlichtheit des zugrunde liegenden Modells, eine hervorragende Übereinstimmung festzustellen. Die Effekte bei unterschiedlichen Aufgabemengen und unterschiedlicher optischer Reinheit der Aufgaben können über den gesamten experimentell zugänglichen Bereich in Kurvenform, Peaklage und Peakhöhe bis auf geringfügige Abweichungen korrekt wiedergegeben werden. Diese Resultate werden noch einmal eindrucksvoll durch die Abbildungen 52 und 53 verdeutlicht, in denen die experimentellen Retentionszeiten der Racemat- und Enantiomerenüberschußpeaks mit denen der Simulationen verglichen werden.

Es erhebt sich nun die Frage, inwieweit die gefundenen Parameter allgemeingültig sind. Chromatographische Säulen unterscheiden sich trotz gleicher Füllung meistens in ihrem Trennverhalten. Diese Unterschiede können z.B. durch unterschiedliche Chargen des Füllmaterials, unterschiedliche Preßdrücke beim Herstellen der Säule und viele andere Faktoren verursacht werden. Dieser Sachverhalt wird auch durch die in der Dissertation von Heinzerling [4] abgebildeten Chromatogramme, die trotz gleicher Aufgaben nach einem Wechsel der Säule andere Retentionszeiten als die der jeweiligen Chromatogramme aus der Arbeit von Coors [5] aufweisen. Um Mißverständnissen vorzubeugen, sei darauf hingewiesen, daß bei Verwendung des gleichen chromatographischen Systems die Messungen reproduziert werden konnten. Für die Simulationsrechnungen müssen bei einem derartigen Systemwechsel lediglich die Kapazitätsfaktoren neu bestimmt werden, da die Simulationsparameter, die sich auf die mobile Phase beziehen, gleich bleiben. Diese Bestimmung der Kapazitätsfaktoren erfolgte wiederum mit Hilfe der Chromatogramme der reinen Enantiomer- und Racemataufgabe. Mit den resultierenden Parameter wurden dann experimentelle, von Heinzerling erstellte Chromatogramme simuliert. Tabelle 19 und die dazu gehörigen Abbildungen A11-A24 zeigen die Ergebnisse dieser Vorgehensweise. Man kann wiederum für die unterschiedlichsten Aufgaben von Enantiomerengemischen eine exzellente Übereinstimmung der Theorie mit dem Experiment erkennen. Die Auftragungen der gemessenen bzw. simulierten Retentionszeiten gegen die jeweilige optische Reinheit der aufgetrennten Proben (Abbildung 54 und 55) heben diesen Befund noch einmal hervor. Zugleich bestätigt die gute Übereinstimmung wiederum die korrekte Parameterwahl für die mobile Phase.

Tabelle 19 : Vergleich der experimentellen [4A] und simulierten Chromatogrammdaten für das 1,1'-Bi-2-naphthol

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*20 (S)	100	31.45	-	9.48		3		30.47	-	9.16		3	
20 (R)	100	31.69	-	9.56		3							
*20	0	34.40	-	10.47		3		34.01			10.34	3	
20	33.33	32.54	34.94	9.85	10.65	3	1.08	32.3	34.57	9.77	10.52	3	1.08
20	60	31.40	36.36	9.47	11.12	3	1.17	31.42	36.5	9.47	11.17	3	1.18
20	80	31.00 31.53	38.84 40.18	9.33 9.51	11.95 12.39	3	1.28 1.30	30.94	38.9	9.31	11.97	3	1.28
20	86	30.45	40.29	9.15	12.43	3	1.36	30.80	40.	9.27	12.33	3	1.33
20	90	30.48	40-42	9.16	12.33	3	1.35	30.71	40.8	9.24	12.60	3	1.36
20	98	30.41	45	9.14	14.00	3	1.53	30.52	44.5	9.17	13.83	3	1.51
100 (R)	100	21.16	-	6.05		3		22.73	-	6.58		3	
100 (S)	100	21.18	-	6.06		3							
100	0	23.56	-		6.85	3		24.71	-		7.24	3	
100	33.33	24.88	≈26.5	7.29	7.83	3	1.07	23.97	26.4	6.99	7.80	3	1.12
100	60	26.02	29.70	7.67	8.90	3	1.16	23.44	29.	6.81	8.67	3	1.27
100	86.	24.55	32.56	7.18	9.85	3	1.37	22.97	34.	6.66	10.33	3	1.55
100	98.	22.67	37.58	6.56	11.53	3	1.76	22.77	39.	6.59	12.00	3	1.82

Parametersatz [4] A :    k<sub>(RR)</sub> :    4.4247                      k<sub>(RS)</sub> :    4.4247                      k<sub>(R)</sub> :    14.2317  
                                  Km<sub>(RR)</sub> :    4.1 10<sup>4</sup> l/mol                      Km<sub>(RS)</sub> :    2.0 10<sup>4</sup> l/mol  
                                  β :            1                                      Bodenzahl: 500

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Abbildung 54 : Auftragung der experimentellen [5A] und simulierten Retentionszeiten gegen die optische Reinheit (Aufgabemenge 20 $\mu$ g)

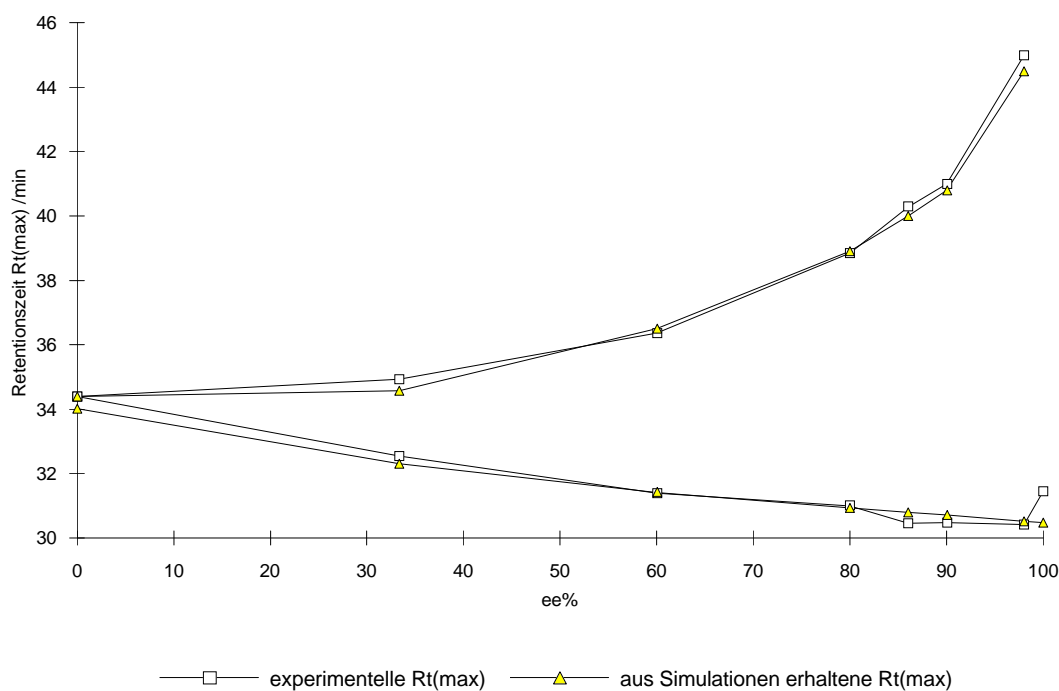
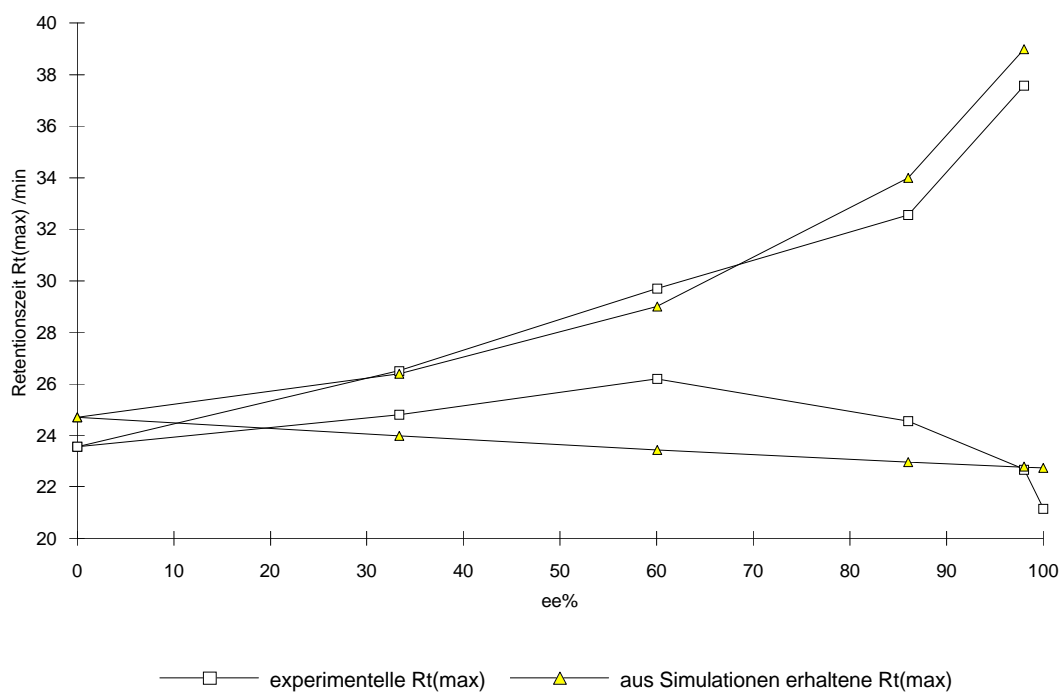


Abbildung 55 : Auftragung der experimentellen [5A] und simulierten Retentionszeiten gegen die optische Reinheit (Aufgabemenge 100  $\mu$ g )



Mit einer weiteren Säule, die erheblich kürzere Retentionszeiten aufwies, ermittelte Heinzerling eine Hyperfläche, die die Abhängigkeit der relativen Retention von der Aufgabemenge und der optischen Reinheit wiedergibt. Die Abbildungen 56 und 57 zeigen die jeweiligen experimentellen bzw. gerechneten Auftragungen der relativen Retentionen  $\alpha$ . Die entsprechenden Werte zu diesen Abbildungen enthält Tabelle 20. Da keine Daten zur reinen Enantiomer- bzw. Racemat-aufgabe vorhanden waren, wurden die zu bestimmenden Kapazitätsfaktoren an das Chromatogramm der 100 $\mu$ g Aufgabe mit der optischen Reinheit 40 ee % angepaßt.

Parametersatz [4] B :      $k_{(RR)}$  :     2.0242                              $k_{(RS)}$  :     2.0242  
                                   $k_{(R)}$  :     5.2976  
                                   $Km_{(RR)}$  :   4.1  $10^4$  l/mol                    $Km_{(RS)}$  :   2.0  $10^4$  l/mol  
                                   $\beta$ :             1                                     Bodenzahl: 500

Nennenswerte Unterschiede fallen nur im Bereich hoher Aufgabemengen auf. Eine erneute Durchsicht der experimentellen Chromatogramme zeigte, daß diese Differenzen in den Bereich der Ablesegenauigkeit fallen. Eine wiederholte Vermessung dieser Hyperfläche unter besseren experimentellen Bedingungen bestätigen den simulierten Verlauf. [57]. Zusammenfassend kann gesagt werden, daß das von mir erstellte Modell seine praktische Anwendbarkeit unter Beweis gestellt hat und sich somit den experimentellen Herausforderungen stellen kann.

Tabelle 20 : Aus Chromatogrammsimulationen ermittelte  $\alpha$ -Werte für verschiedene Aufgabemengen unterschiedlicher optischer Reinheit

ee %	20	40	60	80	90	98	99
Aufgabemenge / $\mu$ g							
0,5	1,01	1,01	1,02	1,06	1,09	1,11	1,11
1	1,04	1,04	1,07	1,1	1,14	1,14	1,16
5	1,05	1,09	1,15	1,24	1,35	1,38	1,41
10	1,05	1,12	1,19	1,3	1,4	1,5	1,51
30	1,05	1,13	1,23	1,39	1,51	1,72	1,77
50	1,05	1,13	1,21	1,38	1,54	1,8	1,85
100	1,05	1,09	1,17	1,32	1,49	1,83	1,94
200	1,02	1,05	1,12	1,2	1,39	1,78	1,9

Tabelle 21 : Aus experimentellen Chromatogrammen [4B] ermittelte  $\alpha$ -Werte für verschiedene Aufgabemengen unterschiedlicher optischer Reinheit

ee %	20	40	60	80	90	98	99
Aufgabemenge / $\mu\text{g}$							
0,5	1,03	1,05	1,09	1,15	1,18	1,11	1,11
1	1,03	1,05	1,1	1,16	1,22	1,14	1,16
5	1,03	1,07	1,1	1,21	1,27	1,42	1,47
10	1,03	1,08	1,12	1,23	1,3	1,46	1,53
30	1,03	1,08	1,14	1,24	1,33	1,48	1,59
50	1,03	1,09	1,15	1,26	1,35	1,51	1,63
100	1,04	1,09	1,17	1,27	1,38	1,61	1,7
200	1,04	1,11	1,19	1,28	1,45	1,68	1,77

Abbildung 56 und 57 : Auftragung der relativen Retention gegen die optische Reinheit und die Aufgabemenge

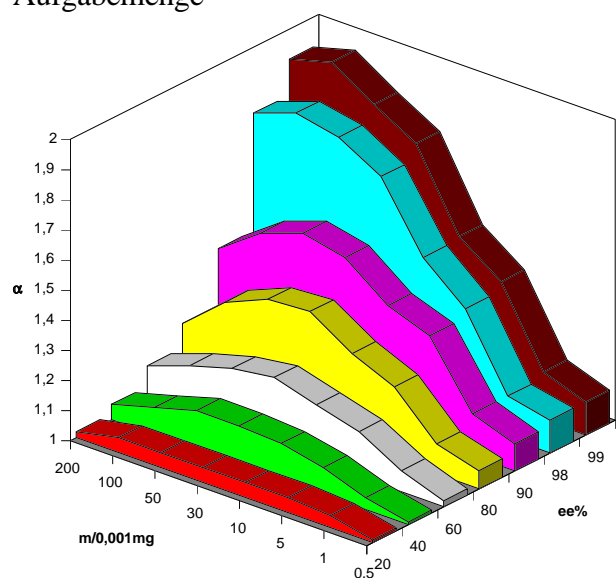


Abb. 56 : rechnerisch ermittelte  $\alpha$ -Werte

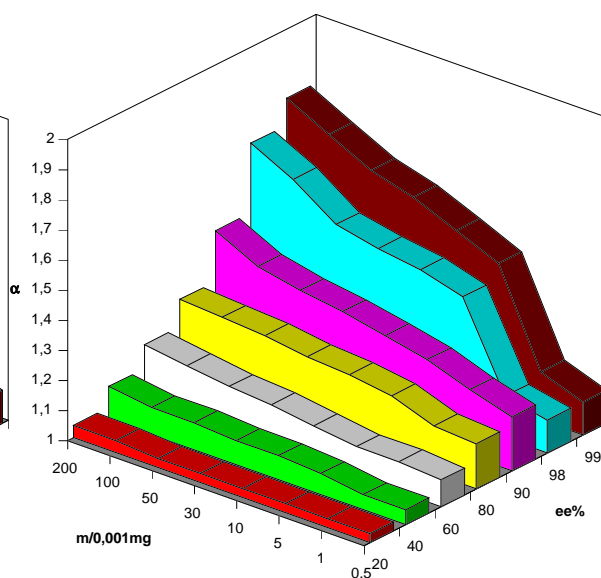


Abb. 57 : experimentell ermittelte  $\alpha$ -Werte

Im Folgendem werden aus den Parametern der Chromatogrammsimulationen noch die nicht verwendeten Gleichgewichtskonstanten  $K_{S(RR)}$  und  $K_{S(RS)}$  berechnet, die auf Grund des Prinzips der Mikroreversibilität, (33) und (34), durch die anderen Konstanten vorgegeben sind. Tabelle 22 faßt die verwendeten und die aus ihnen resultierenden Werte zusammen. Tabelle 23 gibt die in freie Energien umgerechneten Werte an.

Tabelle 22 Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren der Chromatogrammsimulationen

	$K_{m(RR)}$ /(l/mol)	$K_{m(RS)}$ /(l/mol)	$K_{s(RR)}$ /(l/mol)	$K_{s(RS)}$ /(l/mol)	$k_{(RR)}$	$k_{(RS)}$	$k_{(R)}$
[5]	$4.1 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^4$	$7.30 \cdot 10^2$	$7.30 \cdot 10^2$	5.77	5.77	18
[4] A	$4.1 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^4$	$5.61 \cdot 10^2$	$2.73 \cdot 10^2$	4.43	4.43	14.23
[4] B	$4.1 \cdot 10^4$	$2 \cdot 10^4$	$2.56 \cdot 10^2$	$1.25 \cdot 10^2$	2.02	2.02	5.30

Tabelle 23 Aus den Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren der Chromatogrammsimulationen berechnete freie Energien

	$\Delta G_{m(RR)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{m(RS)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{s(RR)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{s(RS)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{k(RR)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{k(RS)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{k(R)}$ /(kcal/mol)
[5]	6.29	5.87	3.91	3.48	1.04	1.04	1.71
[4] A	6.29	5.87	3.75	3.32	0.88	0.88	1.57
[4] B	6.29	5.87	3.29	2.86	0.42	0.42	0.99

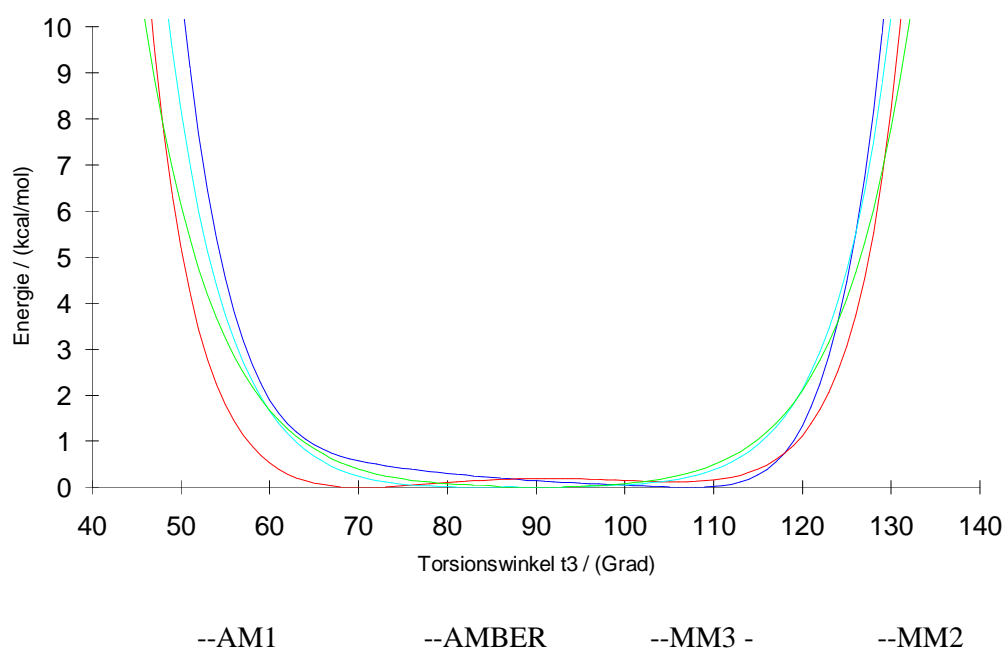
#### 4.1.2. Berechnung von 1,1'-Bi-2-naphthol-Komplexen

Entsprechend dem in Kapitel 3.1 vorgestellten Konzept werden nun Berechnungen diverser Aggregate diskutiert. Obwohl schon im Kapitel 3.3 auf die schlechte Wiedergabe intermolekularer Wechselwirkungen durch einige Kraftfelder hingewiesen wurde, werden sie zur Illustration der auftretenden Probleme mit dargestellt.

##### 4.1.2.1. 1,1'-Bi-2-naphthol

Das relativ starre Binaphthol-Molekül erlaubt nur freie Rotationen um die zwei C-O-Bindungen (Gemäß Abbildung 49 werden die Torsionswinkel  $t_1$  durch die Atome 4-3-2-1 und  $t_2$  durch die Atome 5-6-7-8 definiert). Wesentlich eingeschränkter ist die Beweglichkeit der Bindung zwischen den beiden Aromatsystemen, wobei die Rotationsbarrieren bei  $0^\circ$  bzw  $180^\circ$  die R- und S-Enantiomere voneinander trennen. Um mögliche Assoziatgeometrien abschätzen zu können, ist in Abbildung 58 die Abhängigkeit der "Bildungsenthalpie bzw Bildungsenergie" von dem Torsionswinkel  $t_3$  (entsprechend der Abbildung 49 durch die Atome 3-4-5-6 definiert) für verschiedene Rechenverfahren aufgetragen. (Es werden im folgendem, wenn nicht anders erwähnt, Energiedifferenzen immer auf das berechnete globale Minimum bezogen.)

Abbildung 58 : Änderung der Konformationsenergie mit dem Torsionswinkel  $t_3$



Zur Berechnung dieser Abbildung wurden von dem globalen Minimum ausgehend der Torsionswinkel  $t_3$  im Bereich von  $40^\circ$ - $140^\circ$  um jeweils  $1^\circ$  geändert und die daraus resultierenden Bildungsenthalpien bzw. Bildungsenergien ermittelt. In der Graphik sind jedoch die Differenzen zwischen den jeweiligen globalen Minimumsenergien und den aktuellen Konformationsenergien aufgetragen. Im Rahmen des AM1-Verfahren erhält man Bildungsenthalpien, die sich auf 300 K beziehen. Die Kraftfeldverfahren berechnen dagegen relative Energien bei 0 K.



Man erkennt im Bereich von  $70^{\circ}$ - $110^{\circ}$  einen sehr flachen Verlauf, der dann bei allen Verfahren sehr bald steil ansteigt. Während für das MM3- bzw. MM2 Kraftfeldverfahren die Minimumsgeometrien bei einem sehr ähnlichen Torsionswinkel  $t_3$  liegen,  $87^{\circ}$  bzw  $90^{\circ}$ , berechnet das AM1-Verfahren den energetisch günstigsten Torsionswinkel  $t_3$  bei  $107^{\circ}$ . Das AMBER-Kraftfeld findet dagegen die Minimumsgeometrie bei einem Torsionswinkel  $t_3=75^{\circ}$ . Der Funktionsverlauf für dieses Verfahren unterscheidet sich auch von den anderen Methoden durch das flache Zwischenmaximum bei  $85^{\circ}$ . Auch bei den anderen Kraftfeldverfahren waren kleinere Sprünge im Funktionsverlauf zu beobachten. Diese verschwanden aber, wenn man das als "default" vorgegebene "non bonded cutoff" im verwendeten Macromodel-Programmpaket [31] auf  $20 \text{ \AA}$  erhöhte.

In den Abbildungen B1-B7 ist die energetische Abhängigkeit der Bildungsenergien von den Torsionswinkeln der beiden OH-Gruppen  $t_1$  und  $t_2$  dargestellt. Da kein direkter Vergleich zwischen den verwendeten Verfahren durchgeführt wurde, beziehen sich die aufgetragenen Konformationsenergien nicht auf das globale Minimum. Zur Berechnung der Graphen B1-B7 a, b, c wurde der Torsionswinkel  $t_1$  und  $t_2$  in  $10^{\circ}$ -Schritten von  $0^{\circ}$  bis  $350^{\circ}$  ausgehend vom globalen Minimum des jeweiligen Verfahren variiert. In den Abbildungen B1a-B7a sind die hieraus resultierenden Bildungsenergien gegen die Winkeländerungen aufgetragen. Die jeweils dazu gehörenden Ramachandran-Plots B1b-B7b zeigen die Konturlinien gleicher Energie. Die Abbildungen B1c-B7c geben die jeweilige Minimumsenergie bei vorgegebenen Torsionswinkel  $t_1$  und freiem Winkel  $t_2$  wieder. Die analoge Auftragung für  $t_2$  sieht identisch aus, wie man auch den entsprechenden Abbildungen B1b-B7b entnehmen kann. Die Grundform der Kurve ist, wie zu erwarten, bei allen Verfahren gleich. Die Asymmetrie der beiden Maxima wird durch die jeweilige Stellung der OH-Gruppe zu dem ihr gegenüberliegenden Aromatensystem verursacht und ist beim AMBER-Verfahren am ausgeprägtesten. Auffällig ist hier, daß AM1, AMBER und MM3 als günstigste OH-Gruppenstellung beide Torsionswinkel  $t_1$  und  $t_2$  um  $0^{\circ}$  voraussagen. MM2 erhält dagegen Minima, wenn die beiden Torsionswinkel bei  $0^{\circ}$  und  $180^{\circ}$  liegen. In dieser Stellung zeigt das einsame Elektronenpaar der einen OH-Gruppe auf das H-Atom der zweiten OH-Gruppe. Bei den anderen Verfahren stehen im energetischen Minimum die beiden OH-Gruppen antiparallel zueinander und weisen auf das unter ihnen liegende Aromatensystem.

Aufgesetzte AM1-Ladungen üben, wie die Abbildungen B3 und B7 zeigen, auf die berechneten Minimumsgeometrien des AMBER- sowie des MM3-Verfahren keinen nennenswerten Einfluß aus. Dagegen ändert sich hierdurch beim MM2-Verfahren, Abbildung B5, die Geometrie der Minimumskonfiguration zu  $t_1 \sim 0^{\circ}$  und  $t_2 \sim 0^{\circ}$ . Durch die erhöhten Wechselwirkungen der Partialladungen erniedrigen sich die berechneten Konformationsenergien. Die energetischen Unterschiede zwischen den einzelnen Minimumsgeometrien werden dann dem AM1-Verfahren vergleichbar. Die bei den jeweiligen Minimumsstrukturen vorgefundenen intramolekularen O-H

Abstände weisen darauf hin, daß dieser Befund auf die geänderten Wasserstoffbrückenwechselwirkungen zurückzuführen ist.

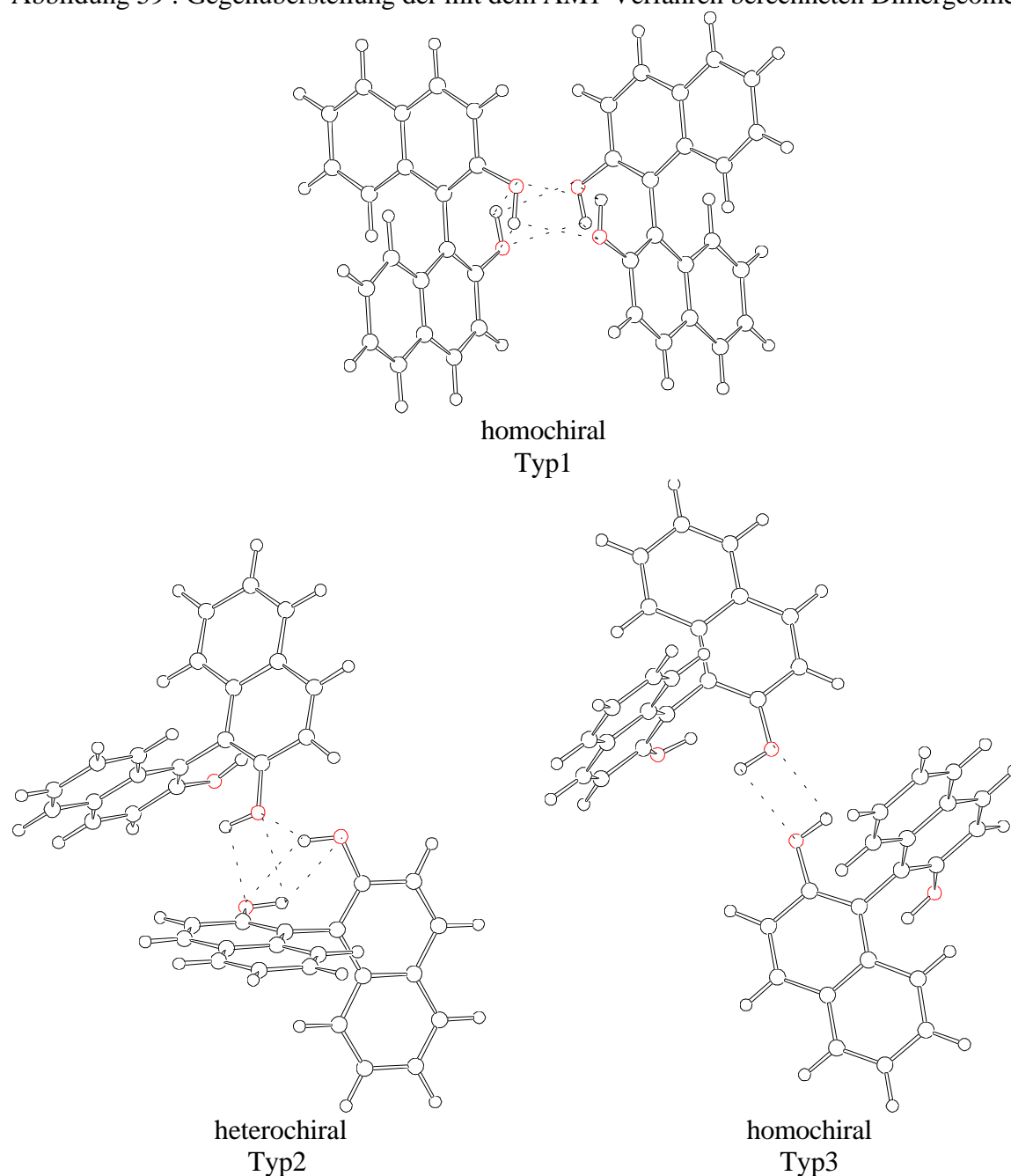
Mit Hilfe der gezeigten Graphen erhält man einen Eindruck, wie sich die Konformationsenergien in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln  $t_1$ ,  $t_2$  und  $t_3$  ändern. Alle Graphen mit aufgesetzten AM1-Ladungen zeigen einen wesentlich flacheren Verlauf. Der Winkel  $t_1$  kann über einen sehr großen Bereich auf die geometrischen Anforderungen für eine Dimerenbildung reagieren, ohne daß große energetische Änderungen entstehen. Intramolekulare Wasserstoffbrücken des antiparallelen Typs werden von fast allen Verfahren bevorzugt. Kleine Änderungen des Rotationswinkels  $t_3$  haben einen geringeren Einfluß auf die Energie als die entsprechenden Änderungen der OH-Gruppen-Rotationen  $t_1$  und  $t_2$ . Die einzelnen Verfahren bewerten das Binaphtholmolekül energetisch und geometrisch im wesentlichen gleich.

Tabelle 24 : Berechnete Torsionswinkel und Bildungsenergien der gefundenen Binaphthol-Konformationen

Verfahren	Energie / (kcal/mol)	Torsions- winkel $t_1$ / (°)	Torsions- winkel $t_2$ / (°)	Torsions- winkel $t_3$ / (°)	Kleinster OH (1-7 bzw 2-8 ) Abstand /(Å)
AM1	-0.56	5.4	5.4	107	3.97
	3.01	176.9	1.8	-95.2	3.50
	6.08	176.1	179.6	-95.4	4.58
Amber	17.17	-1.8	-1.8	-70.3	2.67
	19.59	10.8	175.2	-69.6	2.51
	22.88	178.6	178.6	-80.3	4.15
Amber mit AM1-Ladungen	11.57	-1.5	-1.5	103.5	3.71
	14.36	0.7	178.4	75.2	2.86
	16.37	179.7	179.7	75.2	4.01
MM2	21.15	-1.4	-1.4	-92.1	3.48
	20.53	6.4	179.4	-83.4	3.08
	20.62	179.3	179.3	98.2	4.68
MM2 mit AM1-Ladungen	14.29	-1.8	-1.8	95.9	3.56
	16.82	-1	178.9	85.1	3.21
	19.48	179.9	179.9	80.2	4.15
MM3	24.31	-1.1	-1.1	89.3	3.48
	24.52	-0.4	178.4	86.2	3.33
	24.75	179.9	179.9	-82.7	4.24
MM3 mit AM1-Ladungen	16.65	-2.4	-2.4	91.4	3.53
	18.82	-1.3	178.9	85.9	3.31
	21.07	179.8	179.8	79.7	4.15

#### 4.1.2.2. Binaphthol-Dimere

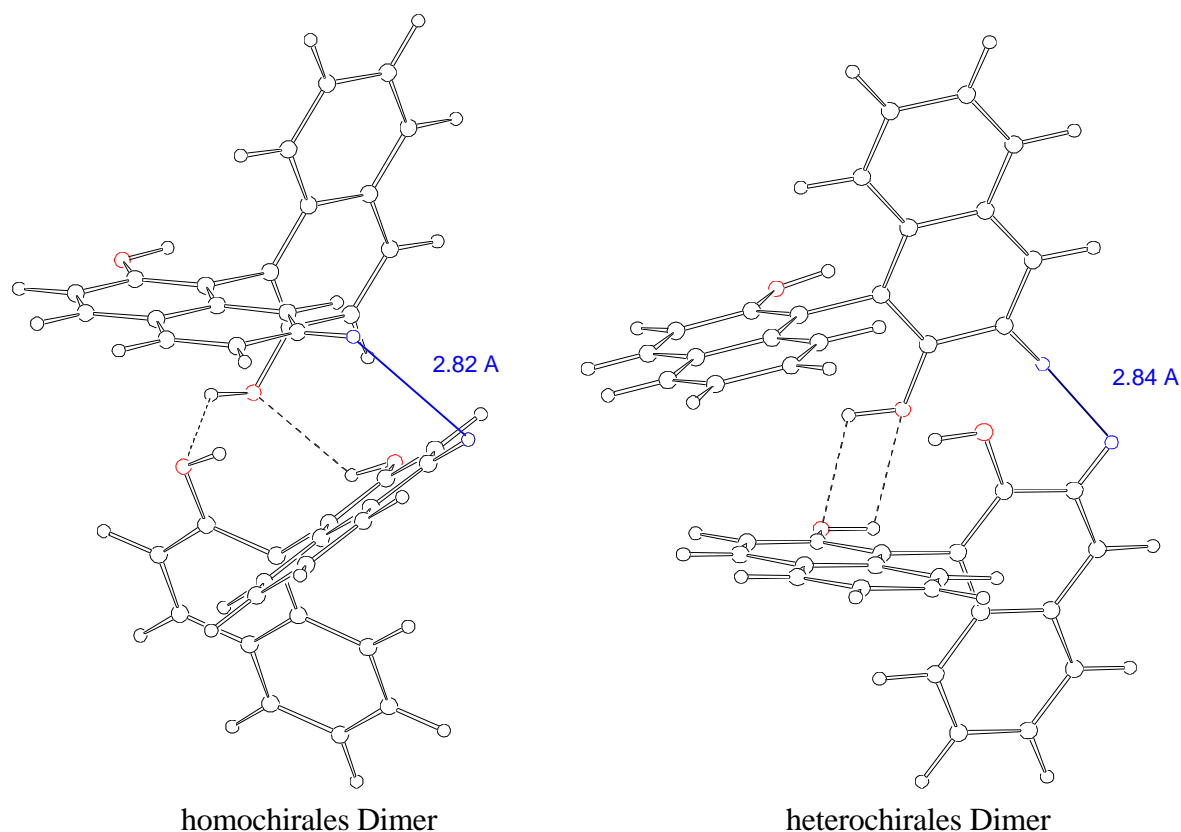
Abbildung 59 : Gegenüberstellung der mit dem AM1-Verfahren berechneten Dimergeometrien



Zur Bildung von Dimeren sind prinzipiell drei Strukturtypen denkbar. Die AM1-geometrieoptimierten Komplexe sind in Abbildung 59 wiedergegeben. Die Geometrien des Typs 1, die aus einem Wasserstoffbrückensystem unter Beteiligung von 4 OH-Gruppen bestehen, sind lediglich von homochiralen Assoziaten realisierbar. Dagegen sind die Komplexe des Typs 2 und 3 sowohl homochiralen als auch heterochiralen Assoziaten zugänglich. Wie die Geometrieoptimierungen zeigen, ist der Übergang zwischen diesen Strukturtypen fließend. Der wesentliche Unterschied zwischen den berechneten homochiralen und heterochiralen Geometrien wird noch näher erläutert, bevor deren Bildungsenthalpien bzw. Bildungsenergien

diskutiert werden. In Abbildung 60 sind die mit dem MM2-Verfahren energieminierten Dimergeometrien dargestellt.

Abbildung 60 : Gegenüberstellung der mit dem MM2-Verfahren berechneten Dimergeometrien



Die blau hervorgehobenen Aromatenwasserstoffatome weisen auf den geometrisch markantesten Unterschied hin. Es handelt sich bei ihnen um die sich am nächsten kommenden Aromatenwasserstoffatome der jeweiligen Monomere. Der homochirale Komplex weicht durch Weitung des Torsionswinkels  $t_3$  des nur mit einer OH-Gruppe am intermolekularen Wasserstoffbrückenwechselwirkungssystem beteiligten Monomers, dem zu engen Kontakt der beiden Wasserstoffatome aus. Dagegen kann im heterochiralen System nur auf Kosten der Wasserstoffbrückenbindung der den hervorgehobenen H-Atomen benachbarten OH-Gruppen ein zu geringer Abstand vermieden werden, so daß ihre optimale Ausbildung behindert wird. Entsprechend diesem Wechselwirkungsprinzip werden auch von den anderen Verfahren die Dimergeometrien bestimmt. Energetisch wirkt sich dieser Unterschied je nach dem verwendeten Verfahren ( in Tabelle 25 wiedergegeben ) um weniger als 1 kcal/mol aus. Im Rahmen der Kraftfeldrechnungen ist dies der dominierende Unterschied zwischen den homochiralen und den heterochiralen Komplexen. Lediglich das AMBER-Verfahren mit aufgesetzten AM1-Ladungen berechnet unter den homochiralen Assoziaten den Geometrietyp 1 stabiler als die Typen 2 bzw. 3.

Das AM1-Verfahren findet ebenfalls den homochiralen Strukturtyp 1 als globales Minimum und kehrt die energetische Reihenfolge der diastereomeren Dimere des Typs 2 und 3 um, da hier durch die Weitung des Torsionswinkels  $t_3$  das homochirale Assoziat energetisch übermäßig beansprucht würde.

Von allen Verfahren werden die homochiralen Dimere gegenüber den heterochiralen Assoziaten als energetisch günstiger bewertet, bisweilen jedoch nur geringfügig (siehe Tabelle 25).

Tabelle 25 : Gesamtenergie  $H$  der berechneten Dimere und Wechselwirkungsenergien  $W_M$  bezogen auf die Minimumsenergien

Verfahren	Typ1 homochiral / (kcal/mol)		Typ2/3 homochiral / (kcal/mol)		Typ2/3 heterochiral / (kcal/mol)		$W_M(\text{homochiral}) -$ $W_M(\text{heterochiral})$ / (kcal/mol)
	H	$W_M$	H	$W_M$	H	$W_M$	
AM1	-5.3	-4.18	-4.02	-2.90	-4.10	-2.98	-1.2
Amber	20.31	-14.03	20.01	-14.33	20.68	-13.66	-0.67
Amber mit AM1-Ladung	10.35	-12.79	11.36	-11.78	11.38	-11.76	-1.03
MM2	31.2	-9.86	31.78	-9.28	31.99	-9.07	-0.79
MM2 mit AM1-Ladung	19.58	-9.00	19.28	-9.3	19.39	-9.19	-0.11
MM3	41.97	-6.65	41.22	-7.40	41.56	-7.06	-0.36
MM3 mit AM1-Ladung	26.21	-7.09	24.69	-8.61	24.87	-8.43	-0.18

Die berechneten Wechselwirkungsenergien einiger Kraftfeldverfahren sind außerordentlich hoch und deshalb mit den Chromatogrammsimulationen nicht zu vereinbaren. In der Hoffnung, daß sich die Resultate unter Einbeziehung der stationären bzw. mobilen Phase verbessern, wird die Bewertung der Kraftfeldverfahren an das Ende der nun folgenden Diskussion der Wechselwirkungen zwischen den Monomeren bzw. den Dimeren und den Säulen- bzw. den Fließmittelmolekülen gestellt. Zum besseren Verständnis des folgenden sind die globalen Minimumsenergien der verwendeten Modellsubstanzen für die mobile bzw. stationäre Phase, die man mit den einzelnen Verfahren erhält, in Tabelle 26 zusammengestellt.

Tabelle 26 : Globale Minimumsenergien des Propylamins und des Isopropanols

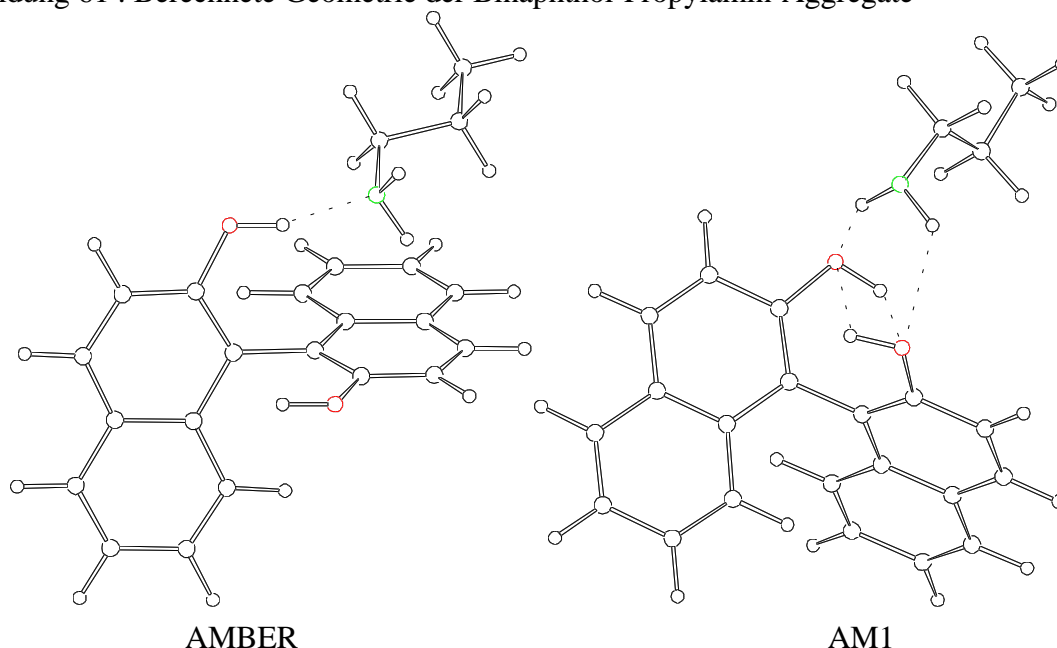
Verfahren	Propylamin H/(kcal/mol)	Isopropanol H/(kcal/mol)
AM1	-22.07	-69.54
Amber	1.16	-0.38
Amber mit AM1-Ladungen	2.12	0.20
MM2	1.99	3.30
MM2 mit AM1-Ladungen	3.58	-3.38
MM3	1.94	4.32
MM3 mit AM1-Ladungen	3.54	-2.39

### 4.1.2.3. Binaphthol-Propylamin-Aggregat

Tabelle 27 : Energien des Binaphthol-Propylamin-Komplexes berechnet mit verschiedenen Verfahren

Verfahren	berechnete Aggregat- energie $H/(kcal/mol)$	Minimumsenergien- summe $H(Bn,Pa)_M$ $/(kcal/mol)$	Wechselwirkungs- energie $W_M$ $/(kcal/mol)$
AM1	-25.17	-22.63	-2.54
Amber	7.74	18.33	-10.74
Amber mit AM1-Ladungen	7.68	13.69	-6.01
MM2	17.42	22.52	-5.10
MM2 mit AM1-Ladungen	12.61	17.87	-5.26
MM3	22.91	26.25	-3.34
MM3 mit AM1-Ladungen	16.48	20.19	-3.71

Abbildung 61 : Berechnete Geometrie der Binaphthol-Propylamin-Aggregate

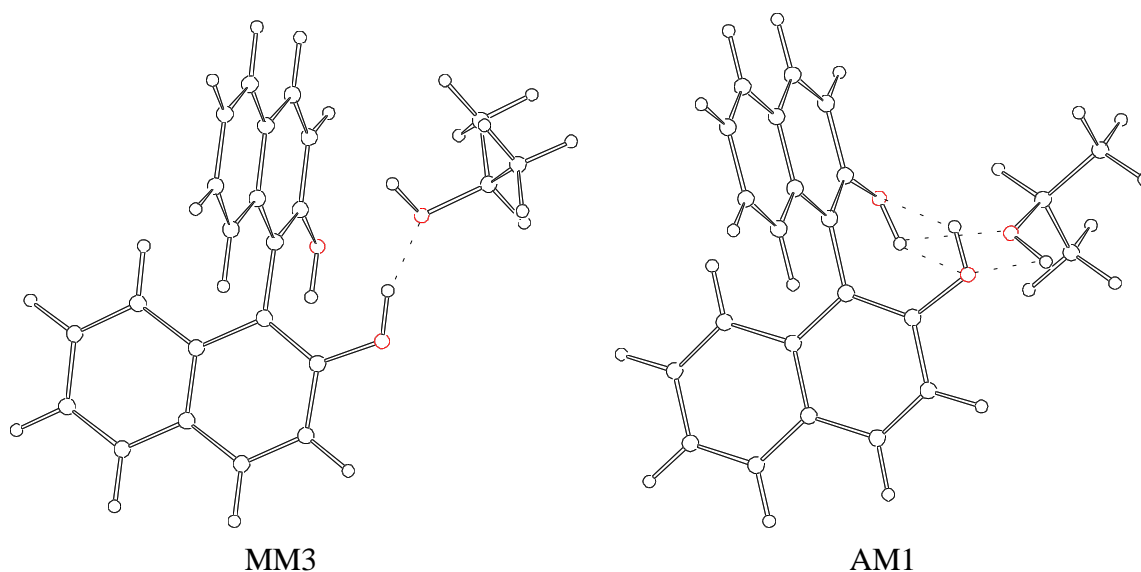


Die verschiedenen Verfahren finden nach der Geometrieoptimierung zwei Strukturtypen im globalen Minimum. Einerseits berechnen die AM1-, sowie MM3- und MM2-Verfahren ohne aufgesetzte Ladungen, ein Geflecht von Wasserstoffbrücken, wie es in Abbildung 61 wiedergegeben wird. Beide Wasserstoffatome am Stickstoffatom bilden eine Wasserstoffbrücke zu den einzelnen Sauerstoffatomen des Binaphthols. Auf der anderen Seite ermitteln die beiden AMBER-Rechnungen und das MM3- sowie das MM2-Verfahren mit aufgesetzten Ladungen die in Abbildung 61 gezeigte Geometrie, exemplarisch für das AMBER-Verfahren ohne aufgesetzte Ladungen dargestellt. Hier bildet sich nur eine Wasserstoffbrücke aus, während

eines der beiden nicht an der Wasserstoffbrückenbindung beteiligten Propylaminwasserstoffatome direkt auf den aromatischen Ring zeigt. In der Tabelle 27 fällt die außerordentliche große Wechselwirkungsenergie des AMBER-Verfahrens mit -10.74 kcal/mol auf. Wie Testrechnungen ergaben, ist sie mit -4.36 kcal/mol auf die Wechselwirkung des Wasserstoffatoms mit dem Naphthylring zurückzuführen. (Ersetzt man unter Beibehaltung der in Abbildung 61 dargestellten Wechselwirkungsgeometrie das Binaphthol durch ein Naphthalin, folgt eine Wechselwirkungsenergie von -4.36 kcal/mol. Nach anschließender Geometrieoptimierung ergab sich sogar ein Energiegewinn von -9.28 kcal/mol für das Naphthalin-Propylamin-System. In der Literatur [58, 59, 60] werden zwar derartige Wechselwirkungen aus Röntgenstrukturuntersuchungen gefordert, aber nicht in dieser Stärke.) Bei anderen Verfahren, die auch diesen Geometrietyp bevorzugen, ist diese Amin-Aromat-Wechselwirkung wesentlich schwächer ausgeprägt.

#### 4.1.2.4. Binaphthol-Isopropanol-Aggregat

Abbildung 62 : Berechnete Geometrie der Binaphthol-Isopropanol-Aggregate



In Tabelle 28 beziehen sich alle Minimumsenergien, bis auf die des MM3-Kraftfeld, auf den in Abbildung 62 für AM1-Verfahren ermittelten Strukturtyp, der zwei Wasserstoffbrücken vorweist. Lediglich das MM3-Kraftfeld berechnet ein Wechselwirkungsmuster, wie es schon aus dem zuvor besprochenen Binaphthol-Propylamin-System bekannt ist. Das Alkoholwasserstoffatom des Isopropanols zeigt auf das aromatische Ringsystem, ohne daß irgendeine Wasserstoffbrücke ausgebildet wird. Abbildung 62 enthält die mit dem MM3-Verfahren ohne aufgesetzte Ladungen berechnete Geometrie.

Tabelle 28 : Energien der Binaphthol-Isopropanol-Komplexe berechnet mit verschiedenen Verfahren

Verfahren	berechnete Aggregat- energie H /(kcal/mol)	Minimumsenergien- summe H(Bn,Al) <sub>M</sub> /(kcal/mol)	Wechselwirkungs- energie W <sub>M</sub> /(kcal/mol)
AM1	-73.30	-70.1	-3.20
Amber	6.67	16.79	-10.12
Amber mit AM1-Ladungen	5.25	11.77	-6.52
MM2	17.04	23.83	-6.79
MM2 mit AM1-Ladungen	4.87	10.73	-5.86
MM3	23.12	28.63	-5.51
MM3 mit AM1-Ladungen	8.51	14.26	-5.75

#### 4.1.2.5. Mit Kraftfeldverfahren berechnete Binaphtholdimer-Propylamin-Aggregate

Tabelle 29 : Gesamtenergie H der berechneten Binaphtholdimer-Propylamin-Komplexe und Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

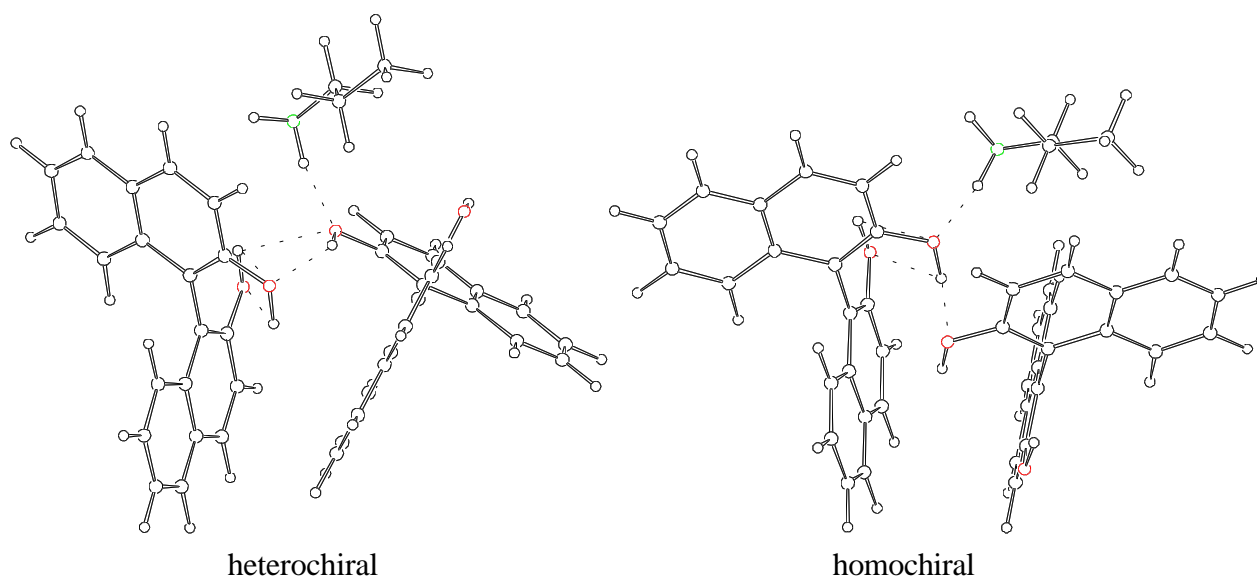
Verfahren	homochirales Aggregat / (kcal/mol)		heterochirales Aggregat / (kcal/mol)		W <sub>M</sub> (homochiral) - W <sub>M</sub> (heterochiral) / (kcal/mol)
	H	W <sub>M</sub>	H	W <sub>M</sub>	
Amber	8.99	-26.51	8.80	-26.7	0.19
Amber mit AM1-Ladungen	5.33	-19.93	5.33	-19.93	0
MM2	26.49	-16.56	26.49	-16.56	0
MM2 mit AM1-Ladungen	15.30	-16.86	15.34	-16.82	-0.04
MM3	37.41	-13.15	38.27	-12.29	-0.86
MM3 mit AM1-Ladungen	23.27	-13.57	23.05	-13.79	0.22

Die gefundenen Minimumsgeometrien dieses Systems spiegeln die schon dargestellten Wechselwirkungsmuster wieder, die durch die Konkurrenz der Aromat-Amin-Wechselwirkungen und der Wasserstoffbrückenbindungen gekennzeichnet sind. In den Kraftfeldrechnungen ist die Stellung des einsamen Elektronenpaares am Propylaminstickstoffatom strukturbestimmend. Zeigt eines der beiden Aminwasserstoffatome, wie es nur bei den heterochiralen Assoziaten der Fall ist, direkt auf einen Naphthylring, so ergibt sich eine niedrigere Wechselwirkungsenergie. Als Beispiel hierfür sind in Abbildung 63 die von dem MM3-Verfahren mit aufgesetzten AM1-Ladungen berechneten Aggregatsgeometrien dargestellt. Eine eindeutige Tendenz, welcher der beiden aus den Diastereomeren gebildeten



Komplexe stabiler ist, läßt sich aus den Kraftfeldberechnungen nicht entnehmen. Die Energieunterschiede sind jedoch nur geringfügig.

Abbildung 63 : Mit dem MM3-Verfahren (mit aufgesetzten AM1-Ladungen) berechnete Geometrie der Binaphtholdimer-Propylamin-Aggregate



#### 4.1.2.6. Mit Kraftfeldverfahren berechnete Binaphtholdimer-Isopropanol-Aggregate

Tabelle 30 : Gesamtenergie H der berechneten Binaphtholdimer-Isopropanol-Komplexe und Wechselwirkungsenergien  $W_M$  bezogen auf die Minimumsenergien

Verfahren	homochirales Aggregat / (kcal/mol)		heterochirales Aggregat / (kcal/mol)		$W_M(\text{homochiral}) - W_M(\text{heterochiral})$ / (kcal/mol)
	H	$W_M$	H	$W_M$	
Amber	7.27	-26.69	8.00	-25.96	-0.73
Amber mit AM1-Ladungen	2.60	-20.74	2.76	-20.58	-0.16
MM2	24.72	-19.64	25.58	-18.78	-0.86
MM2 mit AM1-Ladungen	7.13	-18.07	7.58	-17.62	-0.45
MM3	38.61	-14.33	38.44	-14.5	0.17
MM3 mit AM1-Ladungen	14.77	-16.14	15.66	-15.25	-0.89

Im Falle des Dimer-Isopropanol-Komplexes wird die Wechselwirkung in ähnlicher Weise von der Stellung des einsamen Elektronenpaares am Isopropanolsauerstoffatom wie im Binaphtholdimer-Propylamin-Aggregat geprägt. Im Gegensatz zu den Rechnungen mit dem Propylamin zeigt jedoch hier das Isopropanolwasserstoffatom des homochiralen Assoziates

direkt auf den Aromaten. In den heterochiralen Komplexen steht dagegen meistens das einsame Elektronenpaar über dem Naphthylring. Anzumerken ist ebenfalls, daß das MM2- und das MM3-Verfahren ohne aufgesetzte Ladungen als homochirale Dimerstruktur ein Assoziat des Typs 1 bevorzugen, während dagegen alle anderen Dimer-Isopropylamin-Aggregate den Typen 2 und 3 zugeordnet werden können. Im Gegensatz zu den entsprechenden Propylamin-Komplexen werden von den meisten Verfahren die homochiralen Binaphtholdimer-Isopropanol-Aggregate energetisch bevorzugt.

Mit den insgesamt zu großen Wechselwirkungsenergien der Kraftfeldrechnungen lassen sich keine dem Experiment vergleichbare Chromatogramme erstellen. Zur Orientierung sei erwähnt, daß eine Wechselwirkungsenergie von  $\Delta G = 10$  kcal/mol einer Gleichgewichts-konstanten von  $K = 2.14 \cdot 10^7$  l/mol bei einer Dimerisierung entspricht. Für die Testrechnungen des Kapitels 2.5.3 wurde ein an die Enantiomerenüberschußabtrennung des Binaphthols angelehnter Parametersatz verwendet. Aus ihnen ist der Mißerfolg einer Chromatogramm-simulation unter Verwendung der Resultate aus den Kraftfeldrechnungen schon ableitbar.

Natürlich ist der Einwand berechtigt, daß erst mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen oder moleküldynamischer Rechnungen die Ergebnisse der Kraftfeldrechnungen auf Zimmertemperatur bezogen werden können. Ohne dies im Einzelnen mit Daten zu belegen, ließen sich zwar, je nach verwendetem Kraftfeld, noch Dimere des Binaphthols simulieren, jedoch jede weitere Erhöhung der Anzahl der an der Komplexbildung beteiligten Moleküle führte zum Zerbrechen des Aggregates. Die Dimerisierungsenergien reduzieren sich meistens lediglich nur um 1 kcal/mol. Im Falle der höheren Aggregate wird die Situation auch nicht durch Einschränkungen der Beweglichkeit der Komplexbestandteile verbessert. (z.B.: Bei dem Versuch durch abstandsabhängige Nebenbedingungen zum Kraftfeld eine Wasserstoffbrücke zwischen dem Binaphtholdimer und dem Propylamin (Isopropanol) zu erzwingen, drehte sich das Propylamin (Isopropanol) mit seiner unpolaren Seite zur Wasserstoffbrücke hin. Die verwendeten Komplexe wurden mit den entsprechenden Kraftfeldern voroptimiert, auf imaginäre Schwingungsmoden überprüft und als echte Minima identifiziert. Es wurde ebenso darauf geachtet, daß am Ende der Simulation die energetische Konstanz der Simulationsdauer entsprechend erreicht wurde.) Diese Effekte wurden nicht genauer untersucht und beruhen wahrscheinlich auf der geringen Anzahl an Freiheitsgraden in den verwendeten Molekülen. Im Rahmen der Simulation kann das Aggregat die ihm aufgezwungene kinetische und potentielle Energie nicht sinnvoll verteilen. Eine Erhöhung des Approximationsgrades durch Hinzufügen eines weiteren Alkoholmoleküls erübrigt sich somit wegen der hier dargestellten Ergebnisse. Die hier nur zum Teil geschilderten Artefakte (z.B. Überbetonung der Aromat-Amin-Wechselwirkung) erfordern, daß bei der Verwendung von Kraftfeldverfahren zur Berechnung von intermolekularen Wechselwirkungen alle eventuell vorhandenen Interaktionspaare an kleinen, experimentell untersuchten Modellkomplexen überprüft oder aber durch hochwertige Rechnungen bestätigt werden müssen.

Als einziges Verfahren liefert das AM1-Programm den Chromatogrammen qualitativ entsprechende Ergebnisse. Deshalb wurde dieses Verfahren von den anderen abgetrennt und wird nun im einzelnen besprochen. (In den noch folgenden Tabellen 31- 34 wurden die Abkürzungen Al = Isopropanol, Pa = Isopropylamin, Bn = Binaphthol verwendet. Im Kopf der Tabelle sind jeweils die Bestandteile der Substrukturen angegeben, deren Energien aufgeführt werden. Der Namensbestandteil ss bzw. sr weist auf ein im Komplex enthaltenes homochirales bzw. heterochirales Assoziat hin.)

#### 4.1.2.7. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Propylamin-Aggregate

Tabelle 31 : Binaphthol-Dimer-Propylamin-Aggregat

a: Gesamtenergie des Komplexes H und Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub>

	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2	Bn1 Pa	Bn2 Pa	Bn1	Bn2	Pa
Bn_ss	-29,45	-3,58	-24,31	-23,87	0,19	-0,47	-22,06
Bn_ss_4w	-30,77	-5,13	-24,05	-24,49	-0,40	-0,38	-22,03
Bn_ss_l	-28,64	-4,00	-21,73	-25,06	0,36	-0,50	-22,01
Bn_sr	-29,80	-3,52	-24,26	-24,30	-0,34	0,10	-22,04
Bn_sr_l	-28,01	-4,09	-21,75	-24,33	0,39	-0,48	-22,08

b: Wechselwirkungsenergien W<sub>A</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>A</sub> bezogen auf das Aggregat

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2	Bn1 Pa	Bn2 Pa
Bn_ss	-7,11	-3,30	-2,44	-1,34
Bn_ss_4w	-7,97	-4,36	-1,62	-2,08
Bn_ss_l	-6,49	-3,86	-0,08	-2,55
Bn_sr	-7,51	-3,27	-1,87	-2,35
Bn_sr_l	-5,85	-4,00	-0,06	-1,78

c: Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2	Bn1 Pa	Bn2 Pa	Bn1	Bn2	Pa
Bn_ss	-6,25	-2,46	-1,67	-1,23	0,75	0,09	0,02
Bn_ss_4w	-7,57	-4,01	-1,41	-1,85	0,16	0,18	0,05
Bn_ss_l	-5,44	-2,88	0,91	-2,42	0,92	0,06	0,07
Bn_sr	-6,60	-2,40	-1,62	-1,66	0,22	0,66	0,04
Bn_sr_l	-4,81	-2,97	0,89	-1,69	0,95	0,08	0,00

Abbildung 64 : Binaphtholdimer-Propylamin-Komplexe (siehe Tabelle 31), die durch die Wechselwirkung des Propylamins mit der freien OH-Gruppe der Assoziante des Typs 2 und 3 gebildet werden

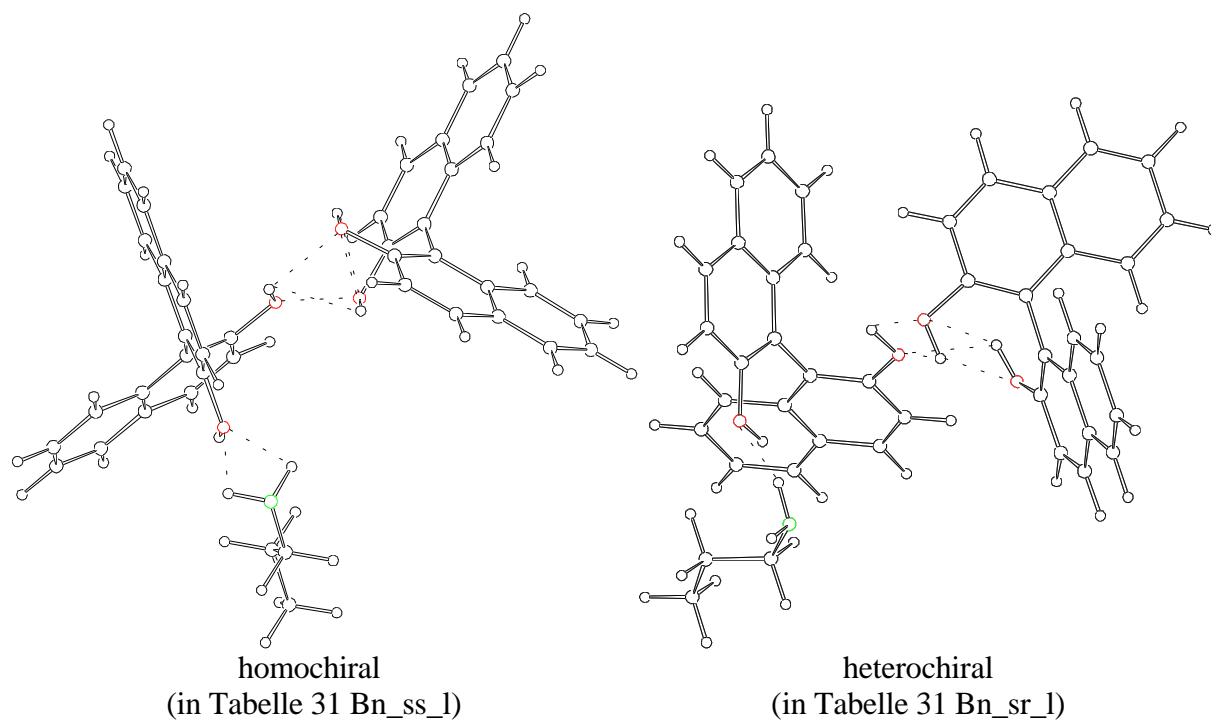


Abbildung 65 : Binaphtholdimer-Propylamin-Komplexe (siehe Tabelle 31), die durch die Einbeziehung des Propylamins in das bestehende Wasserstoffbrückensystem der Assoziante des Typs 2 und 3 gebildet werden

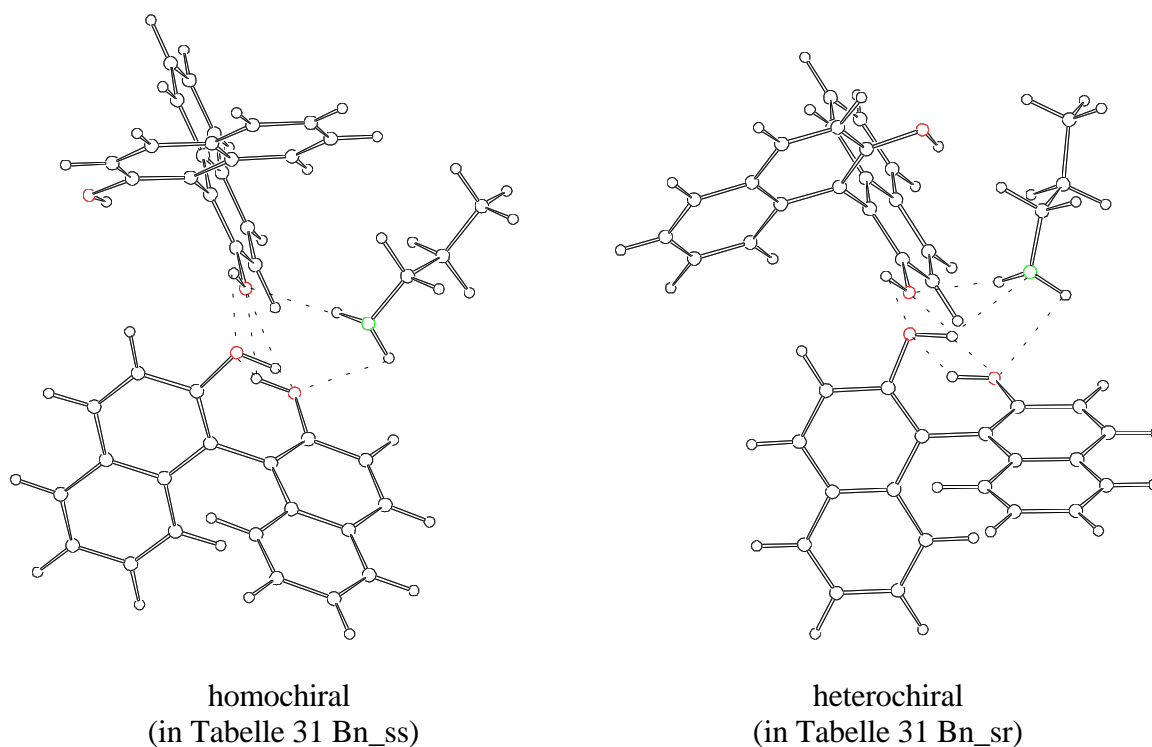
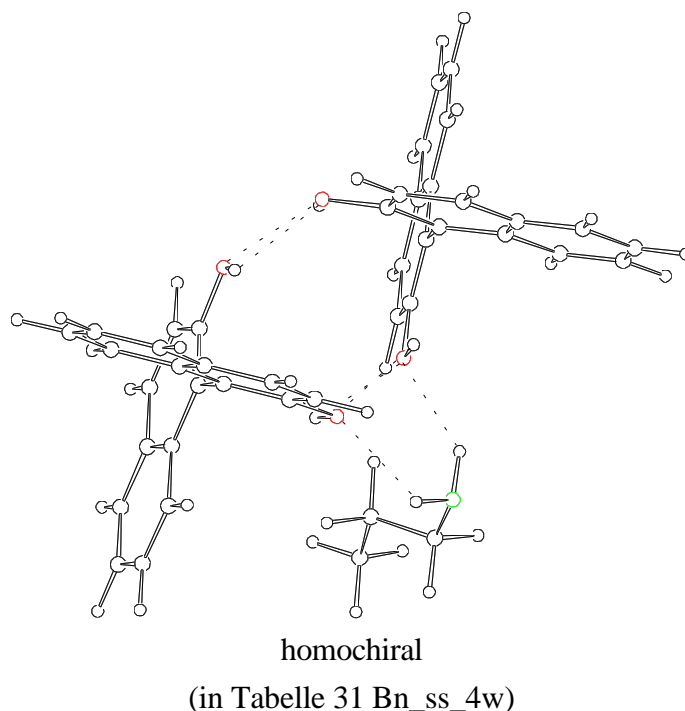


Abbildung 66 : Binaphtholdimer-Propylamin-Komplexe (siehe Tabelle 31), die durch die Einbeziehung des Propylamins in das bestehende Wasserstoffbrückensystem des Assoziates des Typs 1 gebildet werden



Der Angriff des Propylamins auf die noch freie OH-Gruppe eines Dimers des Typs 2 oder 3 erweist sich für die diastereomeren Dimere vorteilhaft. (Abbildung 64 ) Ihre Stabilitäten werden geringfügig verändert. (siehe Tabelle 31 : Bn\_ss\_1, Bn\_sr\_1 ). Wenn das Propylamin jedoch in das bestehende Wasserstoffbrückensystem mit eingebunden wird (Abbildung 65, siehe Tabelle 31: Bn\_ss, Bn\_sr ), erniedrigt sich die Bildungsenthalpie des Gesamtaggregates wesentlich mehr. Zu Gunsten des Gesamtkomplexes wird hier aber auch die Binaphthol-Binaphthol-Wechselwirkung um fast 0.5 kcal/mol geschwächt.

Von allen homochiralen Komplexen sind jedoch Aggregate, die die Dimere des Typs 1 enthalten, die stabilsten ( Abbildung 66, Tabelle 31 : Bn\_ss\_4w).

Die heterochiralen Komplexe weisen in der auf das Aggregat bezogenen Energiebilanz die stärkste Wechselwirkung zum Propylamin auf. Berücksichtigt man jedoch die zur Ausbildung nötigen Konformationsänderungen und bezieht die Stabilisierungsenergien auf die globalen Minimumsenergien, so zeigt auch der homochirale Komplex des Typs 1 (Tabelle 31: Bn\_ss\_4w) eine gleich starke Wechselwirkung zum Propylamin.

#### 4.1.2.8. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregate

Fügt man dem System in einem weiteren Approximationsschritt noch ein zusätzliches Isopropanolmolekül hinzu, so folgen die in Tabelle 32 aufgeführten Bildungsenthalpien. Alle Versuche, die Modellschubstanzen für die mobile und stationäre Phase an zwei räumlich unterschiedlichen Dockingstellen des Binaphtholdimers wechselwirken zu lassen, enden in einem sehr nahen Abstand des Isopropanols zum Propylamin. Das heißt, die Geometrieoptimierung, ausgehend von unterschiedlichsten Startgeometrien des Typs 2 oder 3, ergibt nur Aggregate, in denen die Modellmoleküle mit in das Dimerwasserstoffbrückensystem eingebunden sind. Die hieraus resultierenden stabilsten Komplexe sind in der Tabelle 32 unter der Abkürzung Bn\_ss\_1 (homochiral) bzw. Bn\_sr\_1 (heterochiral) aufgeführt.

Startgeometrien, denen Dimerstrukturen des Typ 1 zu Grunde liegen, gehen im Laufe der Geometrieoptimierungen immer in Komplexe über, die Assoziante des Typs 2 enthalten. (stabilste Geometrie in Tabelle 32 unter Bn\_ss\_4w). Komplexe des Typs 1 spielen aus energetischer Sicht nun keine besondere Rolle mehr.

Für die berechneten Assoziante ergibt sich eine empfindliche Schwächung der Binaphthol-Binaphthol-Wechselwirkung. Dieser Sachverhalt spiegelt sich auch in Tabelle 32 wieder. Auf das Aggregat bezogen, steigt die Assoziatenergie um etwa 2 kcal/mol gegenüber den zuvor besprochenen Trimeren, auf die Minimumsenergien bezogen wird sie sogar repulsiv. Um sowohl mit dem Isopropanol als auch mit dem Propylamin in Wechselwirkung zu treten, muß eines der beiden Binaphtholmoleküle seinen Torsionswinkel  $t_3$  extrem aufweiten. Wie man der Tabelle 32 entnehmen kann, erhöht diese Geometrieänderung in den meisten Fällen die Bildungsenthalpie um etwa 1.3 kcal/mol.

Unter der großen Vielfalt an möglichen Aggregaten erwiesen sich die in Tabelle 32 als Bn\_ss und Bn\_sr aufgeführten Komplexe als die stabilsten. Diese Aggregate sind von der Geometrie und den energetischen Verhältnissen her als unter Vermittlung des Isopropanols entstandene homochirale bzw. heterochirale Komplexe aufzufassen.

Die bei den zuvor besprochenen Trimeren (Binaphtholdimer-Propylamin) noch klaren energetischen Unterschiede der diastereomeren Komplexe werden hier immer mehr verwischt. Im Vergleich zu den Trimeren ist die Wechselwirkung zum Propylamin empfindlich geschwächt. Dagegen kann das Isopropanol in Bezug auf die noch zu besprechenden Binaphtholdimer-Isopropanol Aggregate seine Wasserstoffbrückenbindungen zumindest einem der Binaphtholmoleküle in vollen Umfang erhalten. Die räumliche Konzentration der Moleküle an einem Wechselwirkungsort führt zwangsläufig zu der beobachteten Auflösung der Binaphtholdimersubstruktur in den Aggregaten.

Die beiden Modellverbindungen für die mobile bzw. stationäre Phase tragen durch Wechselwirkungen untereinander nur geringfügig zur Komplexstabilisierung bei. Sowohl auf

Tabelle 32 : Binaphtholdimer-Propylamin-Isopropanol Aggregat

a: Gesamtenergie des Komplexes H und Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub>

	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)														
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2 Pa	Bn1 Bn2 Al	Bn1 Pa Al	Bn2 Pa Al	Bn1 Bn2	Bn1 Pa	Bn1 Al	Bn2 Pa	Bn2 Al	Pa Al	Bn1	Bn2	Pa	Al
Bn_ss_1	-102,67	-27,83	-76,48	-96,59	-96,19	-2,09	-23,96	-71,75	-24,01	-72,18	-92,13	0,36	-0,51	-69,48	-22,06
Bn_sr_1	-102,66	-26,24	-76,21	-96,26	-97,50	-0,44	-24,29	-71,54	-22,88	-72,93	-92,28	-0,26	0,97	-69,48	-22,04
Bn_ss_4w	-102,84	-26,33	-76,47	-97,54	-96,37	-0,69	-23,02	-72,93	-24,17	-71,81	-92,26	0,80	-0,36	-69,46	-21,97
Bn_ss	-103,23	-26,83	-76,77	-97,41	-96,50	-1,01	-23,03	-72,93	-24,32	-71,70	-92,28	0,75	-0,20	-69,49	-22,05
Bn_sr	-103,26	-26,25	-76,72	-97,37	-96,98	-0,30	-23,07	-72,88	-24,17	-72,15	-92,21	0,76	0,02	-69,46	-22,04

b: Wechselwirkungsenergien W<sub>A</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>A</sub> bezogen auf das Aggregat

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)														
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2 Pa	Bn1 Bn2 Al	Bn1 Pa Al	Bn2 Pa Al	Bn1 Bn2	Bn1 Pa	Bn1 Al	Bn2 Pa	Bn2 Al	Pa Al	*Bn1 Bn2 - Pa Al	*Bn1 Pa - Bn2 Al	*Bn1 Pa - Bn2 Al	*Bn1 Al - Pa
Bn_ss_1	-10,98	-5,62	-6,84	-5,41	-4,13	-1,93	-2,25	-2,63	-1,44	-2,18	-0,59	-8,45	-6,54	-5,36	-4,14
Bn_sr_1	-11,85	-4,91	-7,43	-4,48	-6,95	-1,15	-1,99	-1,80	-1,81	-4,42	-0,76	-9,94	-5,44	-6,94	-4,42
Bn_ss_4w	-11,84	-4,80	-7,45	-6,91	-4,58	-1,13	-1,85	-4,26	-1,84	-1,99	-0,82	-9,88	-8,01	-7,04	-4,39
Bn_ss	-12,24	-5,33	-7,83	-6,62	-4,77	-1,56	-1,73	-4,19	-2,08	-2,01	-0,74	-9,95	-8,50	-6,92	-4,42
Bn_sr	-12,54	-4,99	-8,03	-6,63	-5,49	-1,08	-1,79	-4,18	-2,15	-2,70	-0,70	-10,76	-8,04	-7,55	-4,51

c: Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)														
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2 Pa	Bn1 Bn2 Al	Bn1 Pa Al	Bn2 Pa Al	Bn1 Bn2	Bn1 Pa	Bn1 Al	Bn2 Pa	Bn2 Al	Pa Al	Bn1	Bn2	Pa	Al
Bn_ss_1	-9,93	-4,63	-5,82	-4,41	-4,01	-0,97	-1,32	-1,65	-1,37	-2,08	-0,51	0,92	0,05	0,02	0,06
Bn_sr_1	-9,92	-3,04	-5,55	-4,08	-5,32	0,68	-1,65	-1,44	-0,24	-2,83	-0,66	0,30	1,53	0,04	0,06
Bn_ss_4w	-10,10	-3,13	-5,81	-5,36	-4,19	0,43	-0,38	-2,83	-1,53	-1,71	-0,64	1,36	0,20	0,11	0,08
Bn_ss	-10,49	-3,63	-6,11	-5,23	-4,32	0,11	-0,39	-2,83	-1,68	-1,60	-0,66	1,31	0,36	0,03	0,05
Bn_sr	-10,52	-3,05	-6,06	-5,19	-4,80	0,82	-0,43	-2,78	-1,53	-2,05	-0,59	1,32	0,58	0,04	0,08

\*Wechselwirkungsenergie zwischen den durch "-" getrennten Substrukturen

das Aggregat bezogen als auch auf die Minimumsenergien wird die Isopropanol-Propylamin-Wechselwirkungsenergie ungefähr um -0.7 kcal/mol berechnet.

#### 4.1.2.9. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Isopropanol-Aggregate

Bei dieser Aggregatgröße bleibt der homochirale Komplex des Typs 1 (in Tabelle 33 bzw. Abbildung 69 als Bn\_ss\_4w\_1 bezeichnet) noch der stabilste, wenn er mit einem Isopropanol wechselwirkt.

Tabelle : 33 Binaphtholdimer Isopropanol-Aggregat

a: Gesamtenergie des Komplexes H und Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub>

	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2	Bn1 Al	Bn2 Al	Bn1	Bn2	Al
Bn_ss_1	-76,30	-3,97	-72,86	-68,98	-0,47	0,39	-69,45
Bn_sr_1	-76,45	-4,05	-68,99	-72,87	0,45	-0,47	-69,45
Bn_ss	-76,68	-2,20	-71,92	-72,24	0,22	-0,52	-69,48
Bn_sr	-76,60	-2,48	-72,05	-71,95	-0,50	0,07	-69,50
Bn_ss_4w_1	-77,72	-4,90	-71,26	-71,61	-0,33	-0,26	-69,53
Bn_ss_4w_2	-76,33	-4,89	-69,40	-70,53	-0,33	-0,20	-68,01

b: Wechselwirkungsenergien W<sub>A</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>A</sub> bezogen auf das Aggregat

	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2	Bn1 Al	Bn2 Al
Bn_ss_1	-6,77	-3,89	-2,94	0,08
Bn_sr_1	-6,98	-4,03	0,01	-2,94
Bn_ss	-6,90	-1,9	-2,66	-2,24
Bn_sr	-6,67	-2,05	-2,05	-2,52
Bn_ss_4w_1	-7,60	-4,31	-1,39	-1,82
Bn_ss_4w_2	-7,80	-4,36	-1,06	-2,32

c: Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2	Bn1 Al	Bn2 Al	Bn1	Bn2	Al
Bn_ss_1	-5,64	-2,85	-2,76	1,12	0,09	0,17	0,09
Bn_sr_1	-5,79	-2,93	1,11	-2,77	1,01	1,03	0,09
Bn_ss	-6,02	-1,08	-1,82	-2,14	0,78	1,08	0,06
Bn_sr	-5,94	-1,36	-1,95	-1,85	0,06	0,49	0,04
Bn_ss_4w_1	-7,06	-3,78	-1,16	-1,51	0,23	0,82	0,01
Bn_ss_4w_2	-5,67	-3,77	0,70	-0,43	0,23	0,76	1,53



Abbildung 67 : Binaphtholdimer-Isopropanol-Komplexe (siehe Tabelle 31), die durch die Wechselwirkung des Isopropanols zur freien OH-Gruppe der Assoziat des Typs 2 und 3 gebildet werden

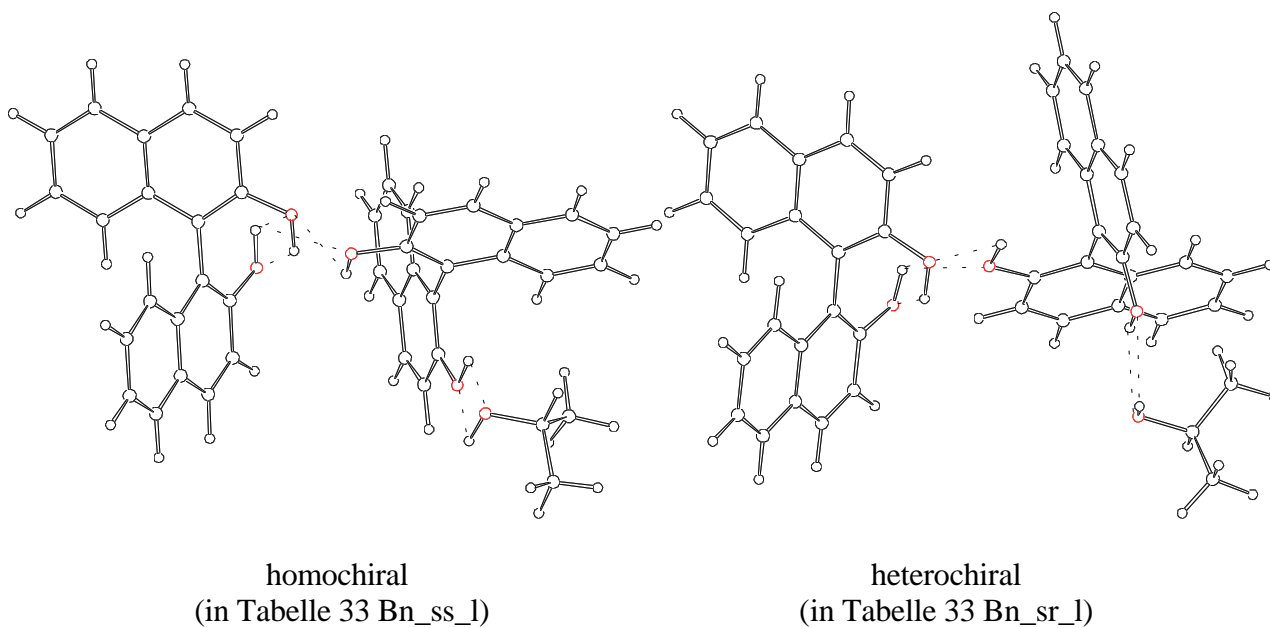


Abbildung 68 : Binaphtholdimer-Isopropanol-Komplexe (siehe Tabelle 31), die durch die Einbeziehung des Isopropanols in das bestehende Wasserstoffbrückensystem der Assoziat des Typs 2 und 3 gebildet werden

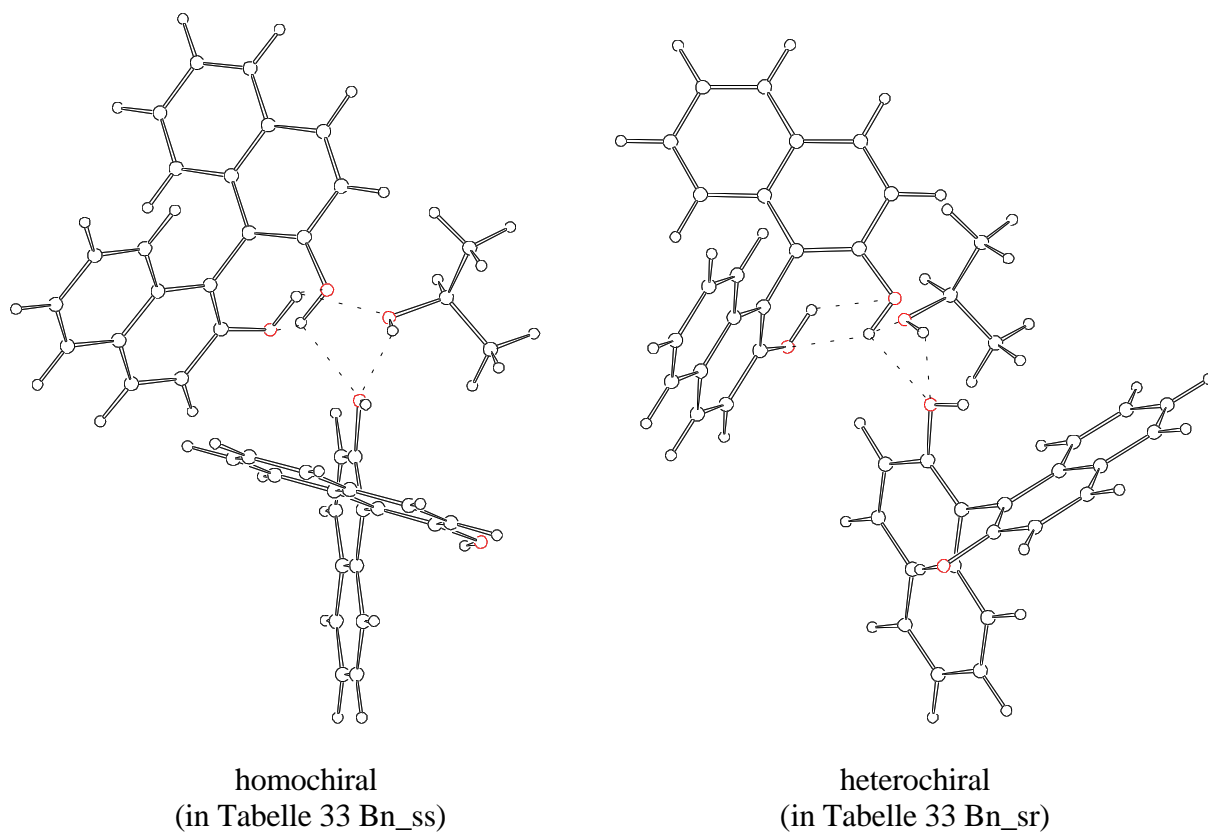
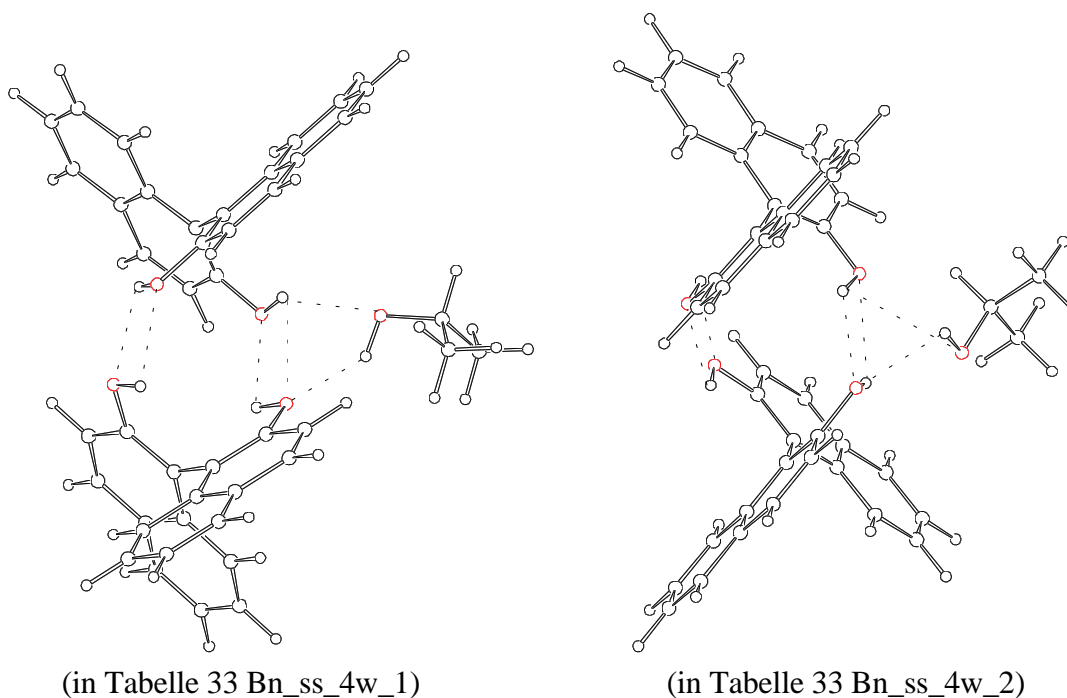


Abbildung 69 : Binaphtholdimer-Isopropanol-Komplexe (siehe Tabelle 33), die durch die Einbeziehung des Isopropanols in das Wasserstoffbrückensystem des Assoziates des Typs 1 gebildet werden



Wie schon beim Binaphtholdimer-Propylamin-Komplex hat die Dockingstelle der Modells substanz einen entscheidenden Einfluß auf die Stabilität der Binaphthol-Binaphthol-Wechselwirkung, wenn im Aggregat Substrukturen des Typs 2 oder 3 vorliegen. Im Gegensatz zu dem Angriff an die noch freie OH-Gruppe (in Tabelle 33 bzw. Abbildung 67 als Bn\_sr\_1 und Bn\_ss\_1 bezeichnet) wird durch die Beteiligung am Wasserstoffbrückensystem die Stabilität der Dimersubstruktur des Geometrietyps 2 und 3 (in Tabelle 33 bzw. Abbildung 68 als Bn\_ss und Bn\_sr aufgeführt) stark gestört. Verglichen mit den reinen Dimeren verringert sich die Stabilität der Assoziatsubstruktur im Aggregat um fast 2 kcal/mol. Der neue Wechselwirkungspartner gleicht diese Verluste aber völlig aus. Auf das Aggregat bezogen, stabilisiert er den Komplex um mehr als 4.5 kcal/mol, ohne jedoch tiefgreifend die Geometrie der Binaphtholmoleküle zu verändern, so daß von den Minimumsenergien ausgehend, immer noch ein Energiegewinn  $W_M$  von fast 4 kcal/mol übrig bleibt.

Die homochiralen Assoziatsubstrukturen des Typs 1 (in Tabelle 33 bzw. Abbildung 69 als Bn\_ss\_4w\_1 und Bn\_ss\_4w\_2 bezeichnet) können eine derartig starke Wechselwirkung zum Isopropanol nicht realisieren. Obwohl diese beiden Komplexe, unter Berücksichtigung der Geometrien im Aggregat, eine fast gleiche Wechselwirkung der Dimermoleküle zum Isopropanol aufweisen, ist der als Bn\_ss\_4w\_2 bezeichnete Komplex auf Grund der geänderten Konformation des Isopropanolmoleküls relativ zu den Minimumsenergien energetisch erheblich ungünstiger.

#### **4.1.2.10. Mit dem AM1-Verfahren berechnete Binaphtholdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregate**

Die Wechselwirkungsenergien des Binaphtholdimers mit zwei Isopropanolmolekülen werden in Tabelle 34 wiedergegeben. Durch das Hinzufügen eines weiteren Alkohols sind Aggregate, die Substrukturen des Typs 1 enthalten (z.B. in Tabelle 34 Bn\_ss\_4w), nicht mehr die stabilsten. Im Gegensatz zu den Binaphtholdimer-Isopropanol-Propylamin-Komplexen zeichnen sich diese Aggregate durch eine eigenständige Geometrie aus. Die berechneten Energien in Tabelle 34 zeigen aber, daß die Isopropanolmoleküle eine energetisch ungünstige Konformation einnehmen müssen, die der in Abbildung 69 als Bn\_ss\_4w\_2 wiedergegeben Geometrie ähnlich ist.

Der schon angesprochene Trend der Destabilisierung der homochiralen bzw. heterochiralen Dimere des Typs 2 und 3 in den Komplexen setzt sich weiter fort. Die als energetisch am günstigsten gefundenen Komplexe ( in Tabelle 34 als Bn\_ss und Bn\_sr bezeichnet) müssen sogar als schwache Wechselwirkung zwischen zwei Isopropanol-Binaphthol-Komplexen aufgefaßt werden. Das legen auch die tabellierten Daten nahe. Die Assoziate tragen, auf das Aggregat bezogen, zum Teil noch geringfügig zur Stabilisierung bei, jedoch aus Sicht der Minimumsenergien ist ihre Wechselwirkung eindeutig repulsiv. Die vorgefundenen Substrukturen sind sogar bis auf minimale Abweichungen mit den Isopropanol-Binaphthol-Komplexen (Tabelle 28, Abbildung 62) deckungsgleich.

Die allgemeine Komplexstabilität wird aber nicht, wie Tabelle 34 belegt, durch die Isopropanol-Isopropanol-Wechselwirkung bestimmt, sondern durch die Wasserstoffbrückenbindung der einzelnen Isopropanolmoleküle zu beiden Binaphtholmolekülen.

Komplexe, in denen eines der Fließmittelmoleküle auch teilweise an die freie OH-Gruppe angreift ( in Tabelle 34 Bn\_ss\_1 und Bn\_sr\_1 genannt), berechnen sich nicht so günstig wie die schon diskutierten Aggregate Bn\_ss und Bn\_sr. Zwar weisen sie, teilweise nur rudimentär, Dimerstrukturen auf, dafür sind sie aber in ihren Wechselwirkungsmöglichkeiten zu den Isopropanolmolekülen eingeschränkt.

Abschließend ist auch hier, wie schon bei den Binaphtholdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregaten, die Auflösung der Dimersubstruktur in den berechneten Komplexen hervorzuheben. Jedoch bleiben hier noch klare Unterschiede zwischen den diastereomeren Aggregaten erhalten.

Tabelle 34 : Binaphtholdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

a: Gesamtenergie des Komplexes H und Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub>

	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)														
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2 Al1	Bn1 Bn2 Al2	Bn1 Al1 Al2	Bn2 Al1 Al2	Bn1 Bn2	Bn1 Al1	Bn1 Al2	Bn2 Al1	Bn2 Al2	Al1 Al2	Bn1	Bn2	Al1	Al2
Bn_ss_l	-149,64	-76,29	-74,38	-142,13	-145,24	-2,09	-71,75	-68,99	-71,85	-72,74	-139,87	0,32	-0,36	-69,42	-69,44
Bn_sr_l	-149,64	-76,03	-73,11	-143,37	-145,06	-0,02	-71,77	-71,33	-73,05	-70,38	-139,48	-0,36	0,99	-69,24	-69,50
Bn_ss_4w	-147,56	-76,16	-75,23	-140,54	-139,36	-3,81	-70,24	-70,32	-70,32	-69,23	-136,01	-0,01	-0,17	-68,00	-68,03
Bn_ss	-149,98	-75,67	-73,24	-144,70	-144,98	0,53	-72,36	-72,16	-72,90	-70,56	-139,62	-0,48	0,87	-69,38	-69,46
Bn_sr	-150,55	-76,15	-73,22	-144,93	-145,03	0,59	-72,96	-70,45	-72,43	-71,93	-139,67	0,81	-0,03	-69,37	-69,47

b: Wechselwirkungsenergien W<sub>A</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>A</sub> bezogen auf das Aggregat

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)														
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2 Al1	Bn1 Bn2 Al2	Bn1 Al1 Al2	Bn2 Al1 Al2	Bn1 Bn2	Bn1 Al1	Bn1 Al2	Bn2 Al1	Bn2 Al2	Al1 Al2	*Bn1 Bn2 Al1 Al2	*Bn1 Al1 Bn2 Al2	*Bn1 Bn2 Al1 Al2	*Bn1 Bn2 Al1 Al2
Bn_ss_l	-10,74	-6,80	-4,91	-3,60	-6,03	-2,04	-2,63	0,11	-2,05	-2,96	-1,02	-7,69	-5,16	-3,94	-5,83
Bn_sr_l	-11,53	-7,16	-4,50	-4,27	-7,31	-0,65	-1,91	-1,73	-4,54	-2,14	-0,74	-10,14	-7,49	-4,37	-7,03
Bn_ss_4w	-11,34	-7,95	-7,04	-4,49	-3,16	-3,63	-2,20	-2,31	-2,13	-1,05	0,02	-7,74	-8,09	-3,39	-4,30
Bn_ss	-11,52	-6,60	-4,24	-5,38	-7,01	0,15	-2,42	-2,30	-4,31	-2,05	-0,79	-10,88	-7,05	-4,93	-7,28
Bn_sr	-12,48	-7,45	-4,62	-6,90	-6,16	-0,18	-4,30	-1,89	-2,93	-2,53	-0,84	-11,47	-5,66	-5,03	-7,86

c: Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)														
Substruktur	Gesamt	Bn1 Bn2 Al1	Bn1 Bn2 Al2	Bn1 Al1 Al2	Bn2 Al1 Al2	Bn1 Bn2	Bn1 Al1	Bn1 Al2	Bn2 Al1	Bn2 Al2	Al1 Al2	Bn1	Bn2	Al1	Al2
Bn_ss_l	-9,44	-5,63	-3,72	-2,49	-5,60	-0,97	-1,65	1,11	-1,75	-2,64	-0,79	0,88	0,20	0,10	0,12
Bn_sr_l	-9,44	-5,37	-2,45	-3,73	-5,42	1,10	-1,67	-1,23	-2,95	-0,28	-0,40	0,20	1,55	0,04	0,30
Bn_ss_4w	-7,36	-5,50	-4,57	-0,90	0,28	-2,69	-0,14	-0,22	-0,22	0,87	3,07	0,55	0,39	1,51	1,54
Bn_ss	-9,78	-5,01	-2,58	-5,06	-5,34	1,65	-2,26	-2,06	-2,80	-0,46	-0,54	0,08	1,43	0,08	0,16
Bn_sr	-10,35	-5,49	-2,56	-5,29	-5,39	1,71	-2,86	-0,35	-2,33	-1,83	-0,59	1,37	0,53	0,07	0,17

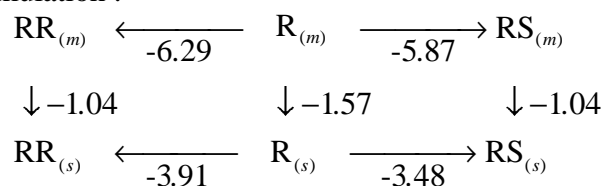
\*Wechselwirkungsenergie zwischen den durch "-" getrennten Substrukturen

#### 4.1.3 Vergleich der Chromatogrammsimulationen mit den AM1-Rechnungen.

Die berechneten AM1-Daten werden in Abbildung 70 den simulierten experimentellen Chromatogrammparametern (Tabelle 23) gegenübergestellt. Entsprechend den schon vorgestellten Approximationsstufen gilt.

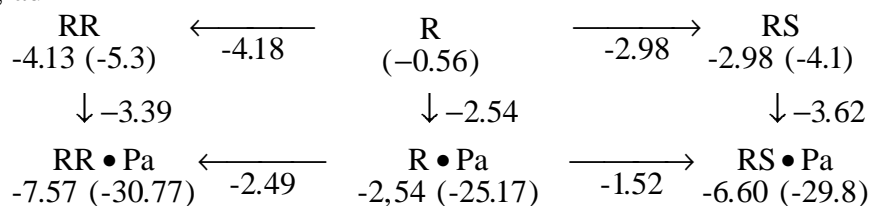
Abbildung 70 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des Binaphthols

Chromatogrammsimulation :

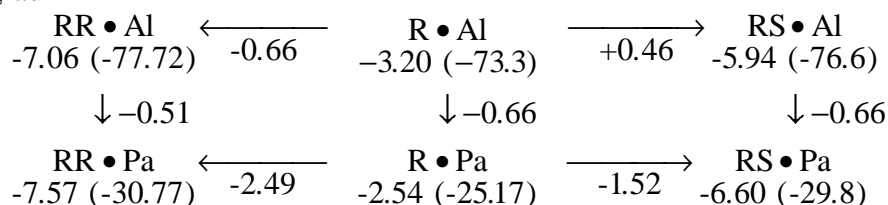


AM1-Rechnungen :

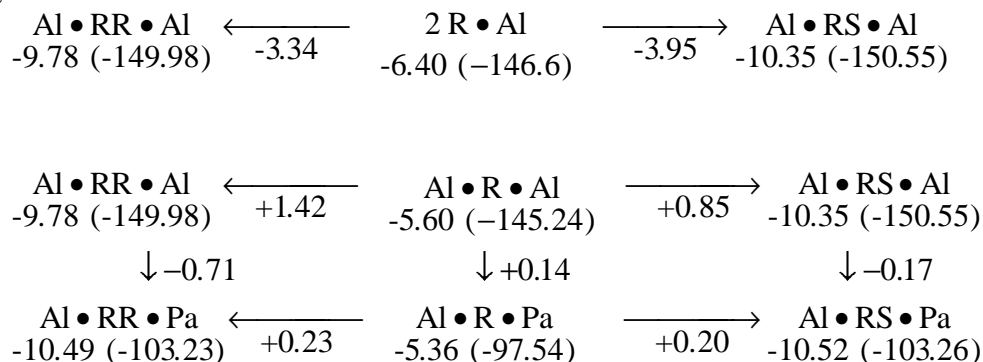
1.Approximationsgrad



2.Approximationsgrad



3.Approximationsgrad



## Erläuterungen zur Abbildung 70

1. Der Übersichtlichkeit halber sind von den Enantiomerpaaren (R, S), (RR, SS) jeweils nur ein Enantiomer aufgeführt.
2. Alle angegebenen Energien sind in kcal/mol angegeben.
3. Die Ergebnisse der Chromatogrammsimulationen beziehen sich auf die freien Energien  $\Delta G$  für die schematisch dargestellten Reaktionen

AM1-Rechnungen : Die unter den Komplexen angegebenen Größen sind:

Die aus der Bildungsenthalpie des Aggregates und der Summe der Minimumsenergien der Fragmente berechnete Wechselwirkungsenergie  $W_M$ .

In den Klammern sind die Bildungsenthalpien der Gesamtkomplexe aufgeführt, die mit dem AM1 Verfahren berechnet wurden.

Unter den Reaktionspfeilen ist die Differenz der Wechselwirkungsenergien  $\Delta W_M$  der Produkte und Edukte für die jeweiligen Reaktionen angegeben. Um die Stöchiometrie gegebenenfalls wieder herzustellen, müssen auf der Produkt- bzw. Eduktseite die entsprechenden Moleküle im energetischen Minimum hinzugefügt werden.

Zur Diskussion der Ergebnisse werden also in grober Näherung Bildungsenthalpien und freie Energien gleichgesetzt, daß heißt entropische Effekte werden vernachlässigt, obgleich ein Vorhandensein nicht ausgeschlossen werden kann.

Der Vergleich der Chromatogrammsimulation mit den AM1-Ergebnissen im 1.Approximationsgrad zeigt :

1. Die Größenordnungen der Parameter, die die Trennung bewirken, stimmen überein.
2. Die internen Größenverhältnisse der Bildungsenergien stimmen überein, mit Ausnahme der Bildungsenthalpiedifferenz, die den Phasenübergang des Monomers beschreibt . Hier muß man jedoch in Betracht ziehen, daß nach Gleichungen (33) und (34) die Kapazitäten der Monomere quadratisch eingehen. Berücksichtigt man diesen Gesichtspunkt, wird auch hier das Verhältnis zu den anderen Kapazitätsfaktoren in einem akzeptablen Rahmen reproduziert.
3. Die Absolutwerte der den Kapazitätsfaktoren entsprechenden Wechselwirkungsenergie-differenzen  $\Delta W_M$  wurden zu groß berechnet. Dies ist aber nicht erstaunlich, da experimentell als Eluens ein Hexan/2-Propanol-Gemisch (60/40) eingesetzt wurde. In den AM1-Rechnungen wurde jedoch nur das Isopropanol als mobile Phase berücksichtigt. Die rechnerisch korrekte Erfassung des Eluens ist derart problematisch, daß der Aufwand nicht gerechtfertigt schien.
4. Die Dimerisierungsenergien werden als zu gering berechnet.

Im 2.Approximationsgrad ist nur eine teilweise Verbesserung der Resultate zu beobachten. Die berechneten Wechselwirkungsenergie-differenzen  $\Delta W_M$  für den Phasenübergang werden auf ein vertretbares Maß reduziert. Zwar sind sie jetzt um ungefähr die Hälfte kleiner als die aus den Simulationen geforderten Werte, aber die Verhältnisse der Kapazitätsfaktoren untereinander

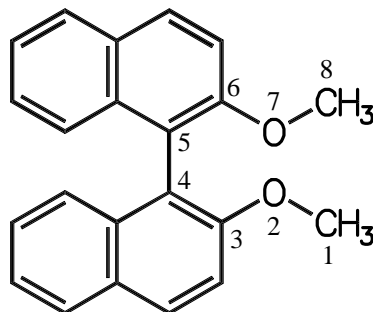
werden nun angemessener wiedergegeben. Dagegen wird die Dimerisierung in der mobilen und in der stationären Phase in diesem Näherungsniveau nicht korrekt erfaßt.

In dem 3.Approximationsgrad werden die AM1-Ergebnisse durch die schon im vorherigen Abschnitt beschriebene Auflösung der Dimerstruktur geprägt. Zur energetischen Erfassung der Enantiomerenüberschußabtrennung des Binaphtols ist dieses Näherungsniveau, wie die AM1-Resultate zeigen, ungeeignet.

Insgesamt gesehen, sind diese Ergebnisse für ein semiempirisches Verfahren ein schon hervorragendes Ergebnis, wobei die Übereinstimmung wohl aber eher einer günstigen Fehlerkompensation, als einer richtigen Berechnung intermolekularer Wechselwirkungen zugeschrieben werden sollte.

#### 4.2.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyl

Abbildung 71 :



Von Hannenberg [57] wurde die Enantiomerenüberschußabtrennung des 2,2' -Dimethoxy-1,1' - binaphthyls untersucht (Abb. 71). Die in den Abbildungen A25-A27 gezeigten Chromatogramme bestätigen auch eine erfolgreiche Separation. Tabelle 35 ermöglicht den numerischen Vergleich mit den Simulationen. Ihr folgend werden die verwendeten Simulationsparameter aufgeführt.

Tabelle 35 : Vergleich der experimentellen [57] und simulierten Chromatogrammdaten für das 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyl

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
20	100	*79.94 77.20		19.82 19.01		3.84	
20	0		*83.64 79.60	20.78 19.73		3.84 3.84	
20	80	79.62 76.89	90.10 85.76	19.73 18.94	22.46 21.33	3.84 3.84	1.14 1.13

Fortsetzung Tabelle 35

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
20	100	80.00		19.83		3.84	
20	0		82.72	20.54		3.84	
20	80	80.50	90.5	19.96	22.57	3.84	1.13

\* zur Anpassung der Chromatogrammsimulationen verwendet



Parametersatz:	$k_{(RR)} :$	16.338	$k_{(RS)} :$	16.338
	$k_{(R)} :$	25.042		
	$Km_{(RR)} :$	80 l/mol	$Km_{(RS)} :$	40 l/mol
	$\beta :$	1	Bodenzahl:	4000

#### 4.2.2. Berechnung von 1,1'-Di-Methoxy- bi- $\beta$ -naphthyl-Komplexen

Zur Ermittlung der stabilsten Geometrie des 2,2' -Dimethoxy-1,1' -binaphthyl wurden, wie im Falle des Binaphthols, die Rotationen um die Torsionswinkel  $t_1$ ,  $t_2$ ,  $t_3$  untersucht, die sich gemäß Abbildung 71 wie folgt definieren:  $t_1$ : Atome 4-3-2-1,  $t_2$ : Atome 5-6-7-8,  $t_3$ : Atome 3-4-5-6

Auf Grund der voluminösen Methoxygruppen sind im Gegensatz zum Binaphthol große Änderungen des Torsionswinkels  $t_3$  nur mit sehr hohen Energieaufwand möglich. Er bleibt nahezu konstant bei  $85^\circ$  ( $\pm 7.5^\circ$ ). Sein Einfluß auf die Torsionswinkel  $t_1$  und  $t_2$  darf jedoch nicht unterschätzt werden. Schon sehr kleine Drehungen ( $1^\circ$ ) von  $t_3$  verändern die Stellung der Methoxygruppen und die daraus resultierenden Minimumsgeometrien wesentlich. In den Abbildungen 72a-c sind die Untersuchungen zur Variation der Torsionswinkel  $t_1$  und  $t_2$  zusammengefaßt. Zur Berechnung der dort aufgetragenen Bildungsenthalpien wurden, ausgehend von der globalen Minimumsstruktur in Abbildung 73, die Winkel  $t_1$  und  $t_2$  in  $10^\circ$ -Schritten sukzessive geändert, jedoch die restlichen Geometrieparameter zur Optimierung freigegeben. Auf diese Weise wurde es den Methylgruppen ermöglicht, extremen sterischen Spannungen auszuweichen. In Abbildung 72a sind mehrere Minima auf der Hyperfläche zu erkennen, die leicht mit Hilfe des Konturliniendiagramms 72b lokalisiert werden können. Abbildung 72c gibt die Minimumsenergien zu dem der Torsionswinkel  $t_1$  wieder. Die globale Minimumsenergie des Dimethoxybinaphthyls wurde mit 19.49 kcal/mol berechnet. Die ihr entsprechende Geometrie ist in Abbildung 73 dargestellt ( $t_1=104^\circ$ ,  $t_2=201.1^\circ$ ,  $t_3=84.0^\circ$ ). Energetisch fast äquivalent ist das lokale Minimum bei  $t_1=174.83^\circ$ ,  $t_2=174.83^\circ$ ,  $t_3=86.3^\circ$  mit einer Bildungsenthalpie von 19.56 kcal/mol. Im Gegensatz zu den OH-Gruppen des Binaphthols weisen hier die Methoxysubstituenten des Dimethoxy-Binaphthyls in den freien Raum.

Abbildung 73 : Globale Minimumsgeometrie des mit dem AM1-Verfahren berechneten 2,2' -Dimethoxy-1,1'-binaphthyls

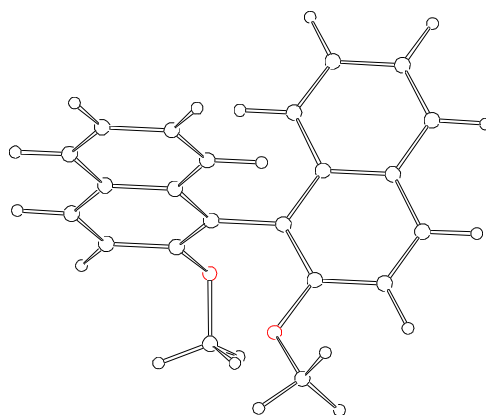


Abbildung 72a :  
Auftragung der Bildungsenthalpie des 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyls in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln  $t_1$  und  $t_2$

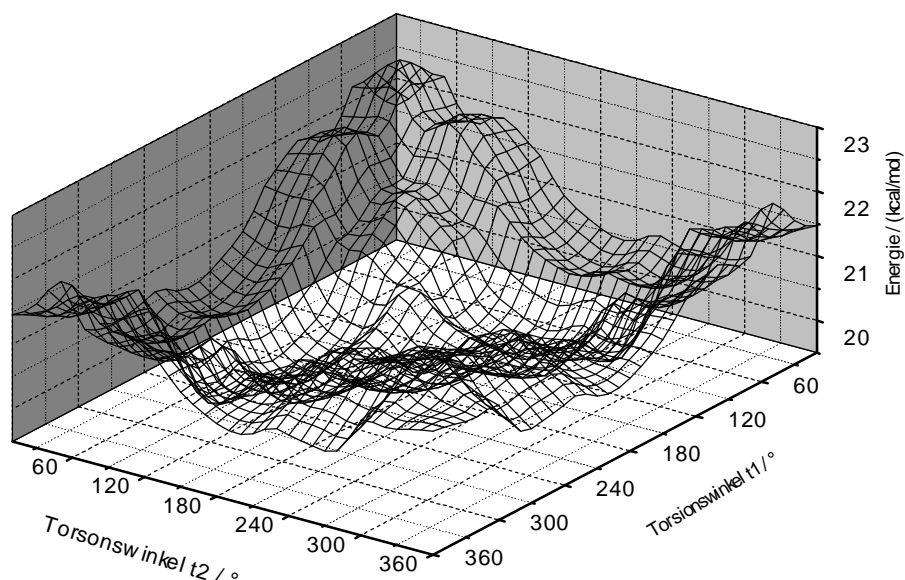


Abbildung 72b :  
Konturliniendiagramm zu Abbildung 72a

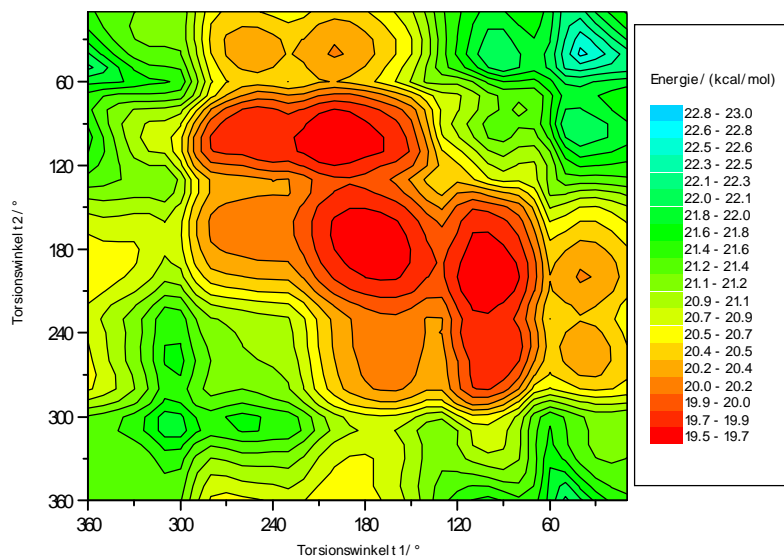
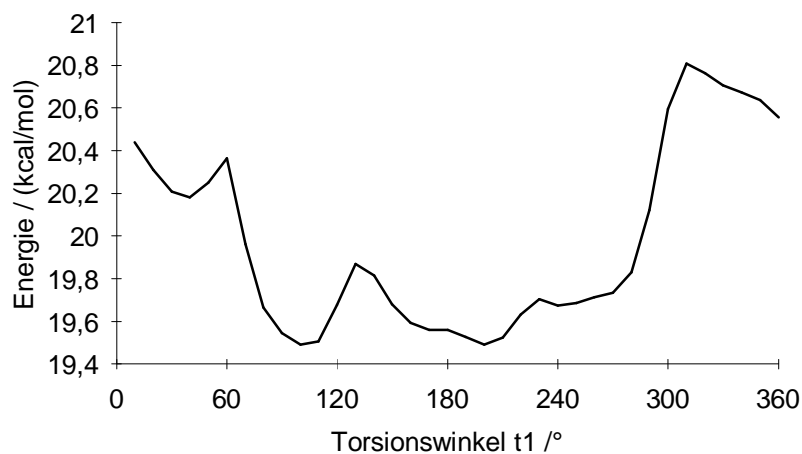
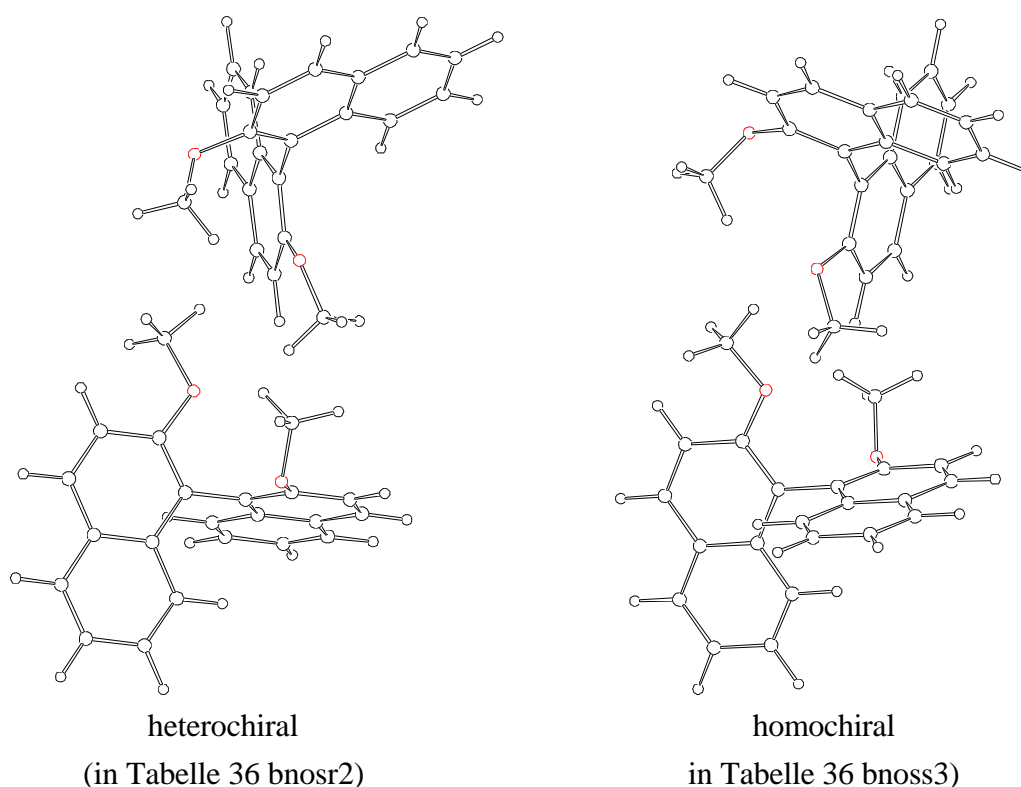


Abbildung 72c :  
Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenen Torsionswinkel  $t_1$  (bezogen auf die Minimumsenergie 19.49 kcal/mol)



Von besonderem Interesse bei dieser Enantiomerenüberschußabtrennung war, wie sich die Substitution der Phenolgruppen im 1,1' -Bi-2-naphthol durch Methoxyfunktionen auswirkt. Aufgrund der Methoxygruppen wird bei der Dimerisierung die Ausbildung eines Wasserstoffbrückensystems wie beim Binaphthol weitgehend unterbunden. Zur Selbstassoziiierung stehen unter dieser Voraussetzung nur Dipol-Dipol-Wechselwirkungen und  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen zur Verfügung. Das AM1-Verfahren berechnet eine schwache Wechselwirkung zwischen den 2,2' -Dimethoxy-1,1' -binaphthyl-Molekülen von maximal -2,24 kcal/mol. Zur Überprüfung des Einflusses der  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen wurde die Wechselwirkungsenergie des Binaphthyl-Dimers in analoger Geometrie zum Methoxyderivat berechnet. Da nur eine vernachlässigbar geringe Wechselwirkungsenergie (-0,06 kcal/mol) ermittelt wird, muß man die Dipol-Dipol-Wechselwirkungen als die treibende Kraft für die Assoziatbildung ansehen. Diese Annahme wird durch die hervorragende Übereinstimmung der AM1-Ergebnisse mit den Dimerisierungsenergien aus den Chromatogrammsimulationen bestätigt.

Abbildung 74 : Dimere des 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyls



Es wurde eine Vielzahl von Assoziaten berechnet, die hier nicht im einzelnen aufgeführt werden. Sie alle zeichnen sich durch fast gleiche auf das Aggregat bezogene Wechselwirkungsenergien  $W_A$  (1-2 kcal/mol) aus. Die in den Komplexen enthaltenen Monomere befinden sich immer in einem lokalen Minimum und ändern ihre Konformationen zur Ausbildung der Wechselwirkungen nur geringfügig (~0,1 kcal/mol).

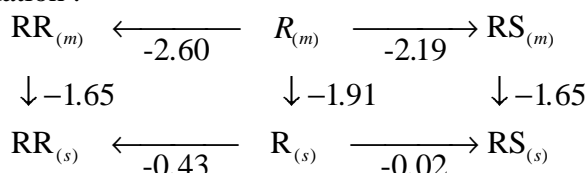
Zunächst wurde zur Konstruktion der Dimere von den gleichen Strukturtypen ausgegangen, die schon bei der Diskussion der Binaphtholassoziante verwendet wurden. Die homochiralen Analoga zu den Geometrietypen 1 und 2 des Binaphthols (in Tabelle 36 als bnoss1 und bnoss2 bezeichnet) unterscheiden sich jedoch hier energetisch kaum noch, während das heterochirale Dimer des Geometrietyps 2 (in Tabelle 36 bnosr1 genannt) um 0,5 kcal/mol instabiler berechnet wird. In Bezug auf die Minimumsenergien sind sie jedoch alle instabil. Eine zweite Gruppe, energetisch niedriger liegender Dimere (in der Tabelle 36 und Abbildung 74 als bnoss3 und bnosr2 bezeichnet) ergibt sich, wenn den Komplexen Monomere in der globalen Minimumsstruktur zugrunde gelegt werden. Man kann sie als Analoga zu den Geometrietypen 2 und 3 des Binaphthols auffassen. Die dem Strukturtyp 1 entsprechende Geometrie (in Tabelle 36 bnoss4 genannt) ist aus energetischer Sicht hier unbedeutend.

Tabelle 36 : Dimerenergien und Wechselwirkungsenergien des 2,2'-Dimethoxy-1,1'-binaphthyls

	berechnete Komplexenergie H/(kcal/mol)	Wechselwirkungsenergie W <sub>A</sub> /(kcal/mol)	Wechselwirkungsenergie W <sub>M</sub> /(kcal/mol)
bnoss1	40.72	-1.66	1.74
bnoss2	40.84	-1.54	1.86
bnoss3	36.74	-2.25	-2.24
bnoss4	38.06	-0.95	-0.92
bnosr1	41.32	-1.06	2.34
bnosr2	37.04	-1.96	-1.94

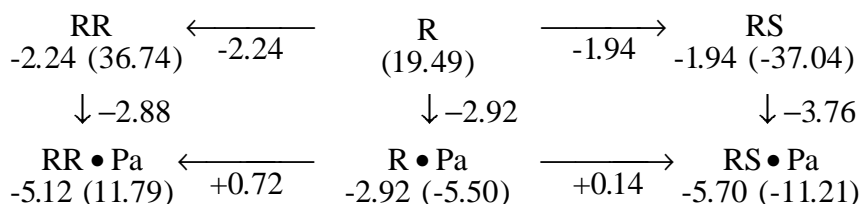
Abbildung 75 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des 2,2' - Dimethoxy-1,1'-binaphthyls (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

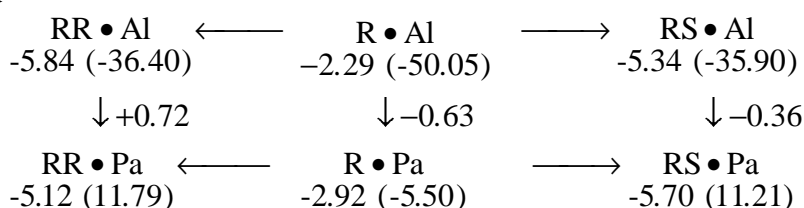


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad



2.Approximationsgrad



Da nur ein Chromatogramm einer nichtracemischen Mischung vorlag und die Konsistenz der Simulationsparameter durch andere Aufgabemengen nicht überprüft werden konnte, wird auf eine tiefergehende Diskussion der Phasenübergänge verzichtet. In der Abbildung 75 werden deshalb nur die Bildungsenergien und die hieraus berechneten Wechselwirkungsenergien  $W_M$  bezogen auf die Minimumsenergien aufgeführt.

Während die mit dem AM1-Verfahren berechneten Dimerisierungsenergien die Simulationsergebnisse korrekt wiedergeben, zeigen die semiempirischen Rechnungen bei der Wiedergabe der Kapazitätsfaktoren größere Abweichungen (siehe Abbildung 75), zumal hier im Gegensatz zu der Enantiomerenüberschußabtrennung des Binaphthols reines Isopropanol als Fließmittel verwendet wurde. Die Chromatogrammsimulationen des Binaphthols (Kapitel 4.1.1) haben aber schon gezeigt, wie empfindlich die Kapazitätsfaktoren vom verwendeten chromatographischen System abhängen. Dementsprechend schwierig ist es, sie durch Simulationen korrekt zu erfassen. Dieser Sachverhalt hat aber keinen Einfluß auf die Wiedergabe der Dimerisierung in der mobilen Phase, die hiervon unberührt bleibt (siehe ebenfalls Kapitel 4.1.1). Die großen Retentionszeitunterschiede zwischen experimentellen Chromatogrammen bei gleichen Versuchsbedingungen rechtfertigen aber keine eingehendere Fehlersuche in den Berechnungen. Bei derartig langen Retentionszeiten sind aber auch bei gewissenhafter experimenteller Versuchsdurchführung Abweichungen in den Retentionszeiten unvermeidbar, z.B. hervorgerufen durch kleinste Unregelmäßigkeiten in der Fließmittelzufuhr. Abschließend kann gesagt werden, daß im Rahmen der bereits diskutierten Anwendungsmöglichkeiten des AM1-Verfahrens, die Dimerisierung auf Dipol-Dipol-Wechselwirkungen zurückzuführen ist. Da die Wiedergabe der Dimerisierung als quantitativ aufgefaßt werden kann, sind auch keine  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen zur Erklärung der aus den Chromatogrammsimulationen geforderten Assoziierungsenergien nötig. Die Phasenübergänge werden dagegen vom AM1-Verfahren nur qualitativ richtig beschrieben.

#### 4.3.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung verschiedener N-Acyl-Aminosäureester

Von Heinzerling [4] wurden die in Tabelle 37 aufgelisteten Aminosäureester experimentell untersucht.

Abbildung 76 :

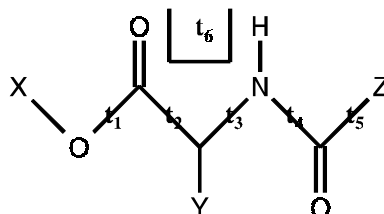


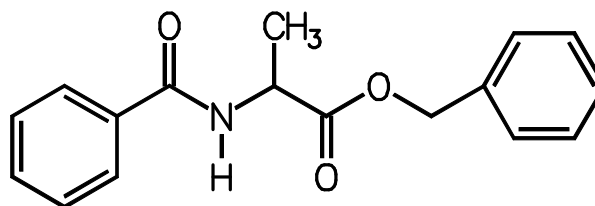
Tabelle 37 : Aufstellung der untersuchten Aminosäureester

X	Y	Z	Abb./ Tab.	Chromatogramm-simulationen	Name (Abkürzung in denTabellen)
CH <sub>2</sub> φ	CH <sub>3</sub>	φ	78, 79 / 38	A28-A33	N-Benzoyl-alaninbenzylester (bb)
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub>	CH <sub>3</sub>	φ	81 / 39	A34-A39	N-Benzoyl-alaninethylester (be)
CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>	φ	83 / 40	A40-A45	N-Benzoyl-alaninisopropylester (bi)
CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	φ	85 / 41	A46-A51	N-Benzoyl-leucinmethylester (bl)
CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	φ	87, 88 / 42	A52-A62	N-Benzoyl-alaninmethylester (bm)
CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> φ	φ	90 / 43	A63-A68	N-Benzoyl-phenylalaninmethylester (bp)
CH <sub>3</sub>	CHOHCH <sub>3</sub>	φ	92, 93 / 44	A69-A75	N-Benzoyl-threoninmethylester (bt)
CH <sub>3</sub>	CH(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	φ	95 / 45	A76-A81	N-Benzoyl-valinmethylester (bv)
CH <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub>	Naphthyl	97, 98 / 46	A82-A87	N-2-Naphthoyl-alaninmethylester (cn)

Die gemessenen Chromatogramme und die Gegenüberstellungen mit den Simulationen sind im Anhang, Abbildung A28 -A87, dargestellt. Die nun folgenden Tabellen fassen die erhaltenen Resultate zusammen. Die zur Berechnung benötigten Parameter sind unter den Tabellen aufgeführt. Ihnen folgt jeweils der graphische Vergleich der Retentionsmaxima der experimentellen und der berechneten Chromatogramme, sowie gegebenenfalls der relativen Retentionen.

Nur bei einigen Verbindungen (N-Benzoyl-alaninbenzylester, N-Benzoyl-alaninmethylester, N-Benzoyl-phenylalaninmethylester, N-Benzoyl-threoninmethylester und N-2-Naphthoyl-alaninmethylester) konnte man eine sichtbare Enantiomerenüberschußabtrennung feststellen. In allen anderen Fällen war jedoch zumindest eine Antrennung analytisch nachweisbar, die auch durch die entsprechenden Simulationen bestätigt wird. In den Simulationen zur Separierung des N-Benzoyl-alaninethylester wurde mit Hilfe der Rechnungen die Schulter im experimentellen Chromatogramm (Abbildung A36, A37 ) als Racematfraktion identifiziert.

Abbildung 77 :



N-Benzoyl-alaninbenzylester

Tabelle 38 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-alaninbenzylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
20	100	38.61 38.60		11.87 11.87		3.		38.61		11.87		3.	
*20	0		38.80	11.93		3.			39.20	12.07		3.	
*20	60	38.81	39.3	11.94	12.07	3.	1.01	38.80	39.4	11.93	12.13	3.	1.02
20	80	38.78	39.5	11.93	12.17	3.	1.02	38.69	40	11.90	12.33	3.	1.04
20	90	39.17	40.2	12.06	12.4	3.	1.03	38.65	40.5	11.88	12.5	3.	1.05
100	60	38.26	38.97	11.75	11.99	3.	1.02	38.25	38.85	11.75	11.95	3.	1.02

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	11.5520	$k_{(RS)}$ :	12.3333
$k_{(R)}$ :	13.0		
$Km_{(RR)}$ :	8.0 10 <sup>4</sup> l/mol	$Km_{(RS)}$ :	6.0 10 <sup>4</sup> l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	4000

Abbildung 78 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20  $\mu\text{g}$  N-Benzoyl-alaninbenzylester

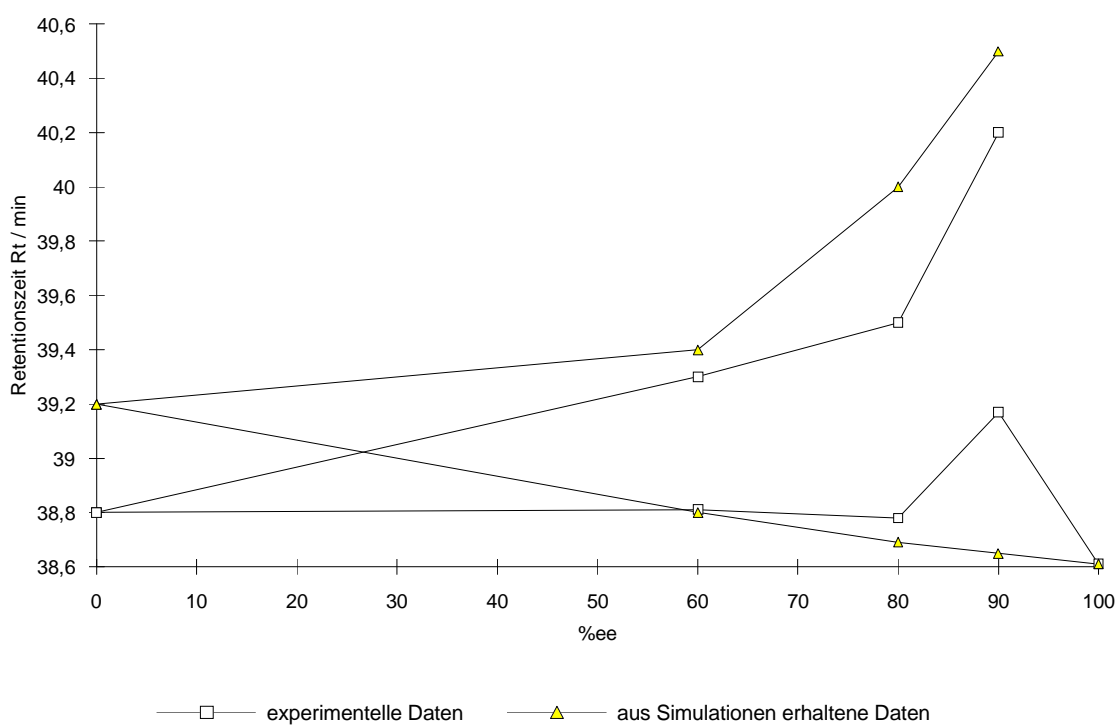


Abbildung 79 : Auftragung der relative Retentionen gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20  $\mu\text{g}$  N-Benzoyl-alaninbenzylester

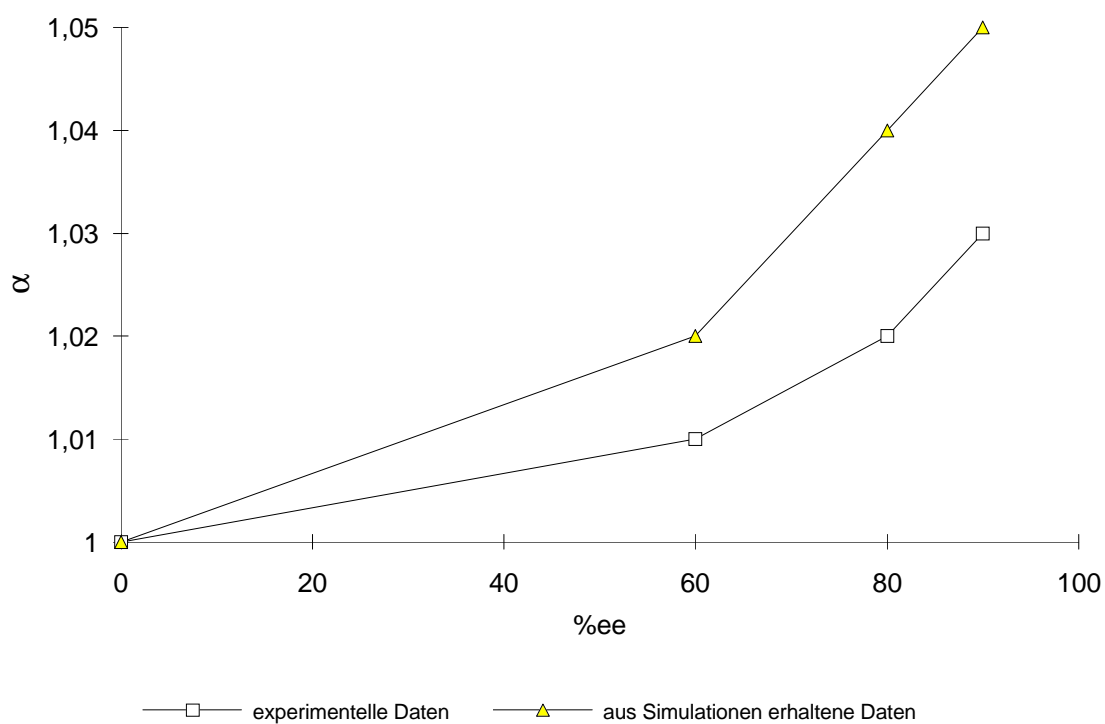
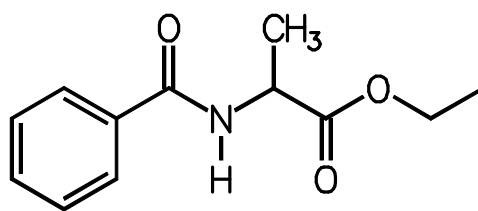




Abbildung 80 :



N-Benzoyl-alaninethylester

Tabelle 39 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-alaninethylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimenteller Peak Rt <sub>max</sub> /min	k'1	t <sub>0</sub> /min	simulierter Peak Rt <sub>max</sub> /min	k'1	t <sub>0</sub> /min
20	100	*23.85 23.95	6.99	3.	23.85	6.99	3.
20	0	*24.08	7.03	3.	24.12	7.04	3.
20	60	24.06	7.02	3.	23.95	6.98	3.
20	80	23.89	6.96	3.	23.90	6.97	3.
20	90	23.98	6.99	3.	23.87	6.96	3.
100	80	23.12	6.71	3.	23.27	6.76	3.

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:  $k_{(RR)}$  : 6.5875       $k_{(RS)}$  : 6.5875       $k_{(R)}$  : 9.0  
 $Km_{(RR)}$  : 1.0 10<sup>5</sup> l/mol       $Km_{(RS)}$  : 7.0 10<sup>4</sup> l/mol  
 $\beta$  : 1      Bodenzahl: 4000

Mit Hilfe der Simulationen konnte eine Auftrennung als leichte Schulter im Chromatogramm erkannt werden. Somit kann z.B. der 20 µg Aufgabe der optischen Reinheit 60 %ee eine relative Retention von  $\alpha = 1.03$  in der berechneten Trennung zugeordnet werden.

Abbildung 81 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg N-Benzoyl-alaninethylester

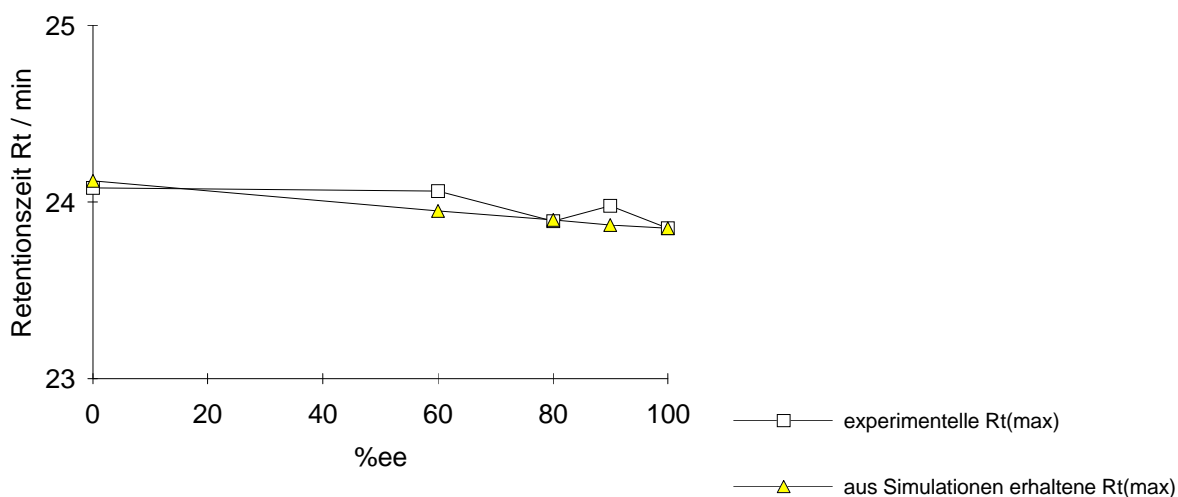
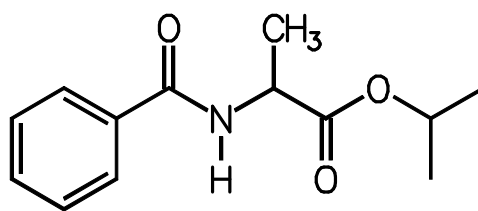


Abbildung 82 :



N-Benzoyl-alaninisopropylester

Tabelle 40 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-alaninisopropylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimenteller Peak Rt <sub>max</sub> /min	k' <sub>1</sub>	t <sub>0</sub> /min	simulierter Peak Rt <sub>max</sub> /min	k' <sub>1</sub>	t <sub>0</sub> /min
20	100	*17.85 18.13	4.95 5.04	3.0	17.85	4.95	3.
20	0	*18.22	5.07	3.0	18.02	5.01	3.
20	60	18.18 18.22	5.06 5.07	3.0	17.95	4.98	3.
20	80	18.24	5.08	3.0	17.88	4.96	3.
20	90	18.18	5.06	3.0	17.86	4.95	3.
100	80	17.68	4.89	3.0	17.54	4.84	3.

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	4.7461	$k_{(RS)}$ :	4.7461
$k_{(R)}$ :	6.67		
$Km_{(RR)}$ :	$2.0 \cdot 10^5$ l/mol	$Km_{(RS)}$ :	$1.0 \cdot 10^5$ l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	2000

Abbildung 83 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg N-Benzoyl-alaninisopropylester

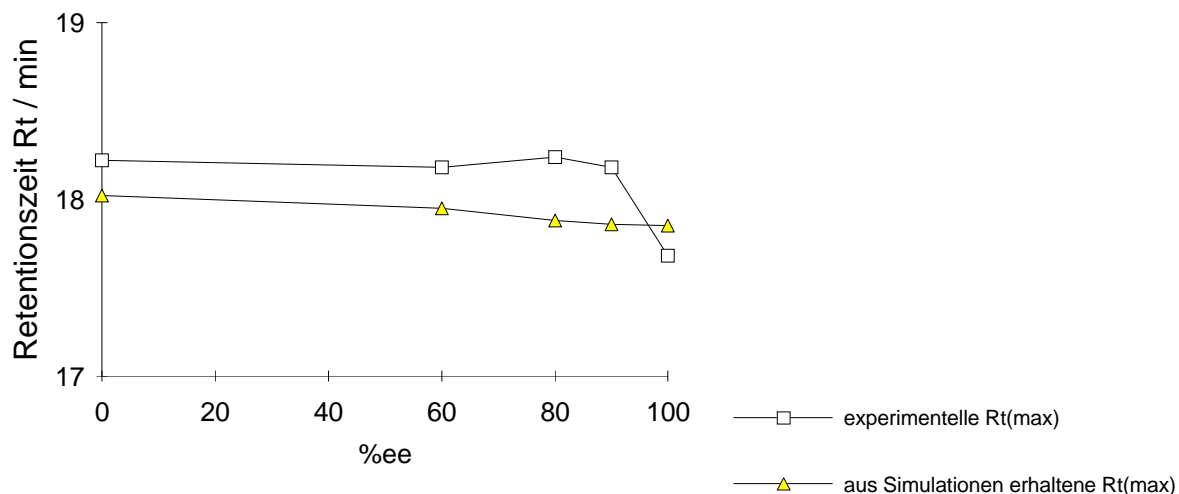
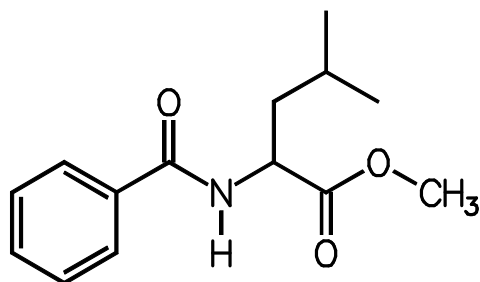


Abbildung 84 :



N-Benzoyl-leucinmethylester

Tabelle 41 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-leucinmethylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimenteller Peak Rt <sub>max</sub> /min	k'1	t <sub>0</sub> /min	simulierter Peak Rt <sub>max</sub> /min	k'1	t <sub>0</sub> /min
*20	100	30.37	9.26	2.96	30.38	9.26	2.96
*20	0	30.67	9.34	2.96	30.71	9.38	2.96
20	60	30.46	9.30	2.96	30.61	9.34	2.96
20	80	30.24	9.22	2.96	30.49	9.30	2.96
20	90	30.02	9.14	2.96	30.44	9.28	2.96
100	80	22.40	8.76	2.30	28.91	8.76	2.96

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	8.2361	$k_{(RS)}$ :	8.2361
$k_{(R)}$ :	10.4865		
$Km_{(RR)}$ :	$2.0 \cdot 10^4$ l/mol	$Km_{(RS)}$ :	$2.0 \cdot 10^4$ l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	1000

Abbildung 85 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg N-Benzoyl-leucinmethylester

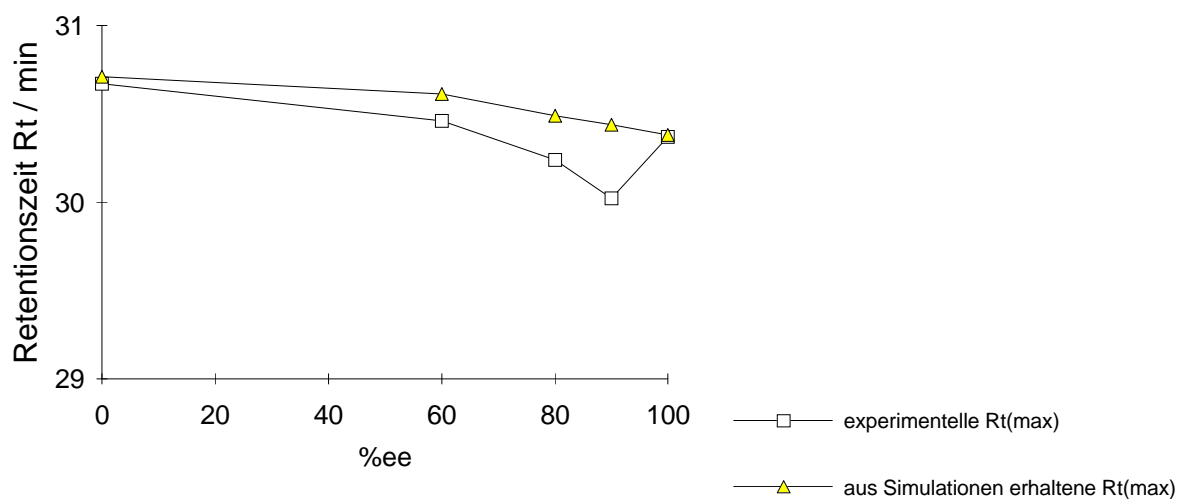
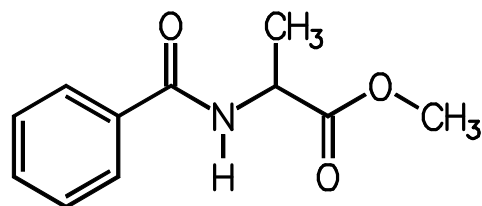


Abbildung 86 :



Benzoyl-alaninmethylester

Tabelle 42 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-alaninmethylesters

Aufgabe- menge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*20	100	48.61	-	15.48	-	2.95	-	48.61		15.48	-	2.95	-
*20	0		48.67	15.78	-	2.90	1.		49.56	15.79	-	2.95	1.
20	40	48.36	49.12	15.68	15.97	2.90	1.02	49.23	50.4	15.69	16.08	2.95	1.02
20	60	48.79	50.5	15.82	16.41	2.90	1.04	49.02	51.	15.62	16.28	2.95	1.04
20	74	47.37	ca.50	15.33	16.24	2.90	1.06	48.89	51.8	15.57	16.56	2.95	1.06
100	100	43.74		13.1		3.08	1-	44.33		14.03		2.95	-
100	0		43.52	13.2		3.09	1.		44.92	14.23		2.95	1
100	40	44.36	45.28	13.4	13.7	3.08	1.02	44.73	45.4	14.16	14.38	2.95	1.02
100	60	44.40	46.2	13.4	14.	3.08	1.05	44.59	46.1	14.11	14.63	2.95	1.04
100	74	43.12	46.	13.	13.9	3.08	1.07	44.50	47.5	14.08	15.1	2.95	1.07
100	94	43.52	ca.48.	13.1	14.53	3.09	1.11	44.37	50.	14.04	15.95	2.95	1.13

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:	$k_{(RR)}$ :	12.8761	$k_{(RS)}$ :	12.8761
	$k_{(R)}$ :	19.3390		
	$Km_{(RR)}$ :	$3.0 \cdot 10^4$ l/mol	$Km_{(RS)}$ :	$3.0 \cdot 10^4$ l/mol
	$\beta$ :	1	Bodenzahl:	4000

Abb 87 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit

Aufgabe von 20  $\mu$ g N-Benzoyl-alaninmethylester    Aufgabe von 100  $\mu$ g N-Benzoyl-alaninmethylester

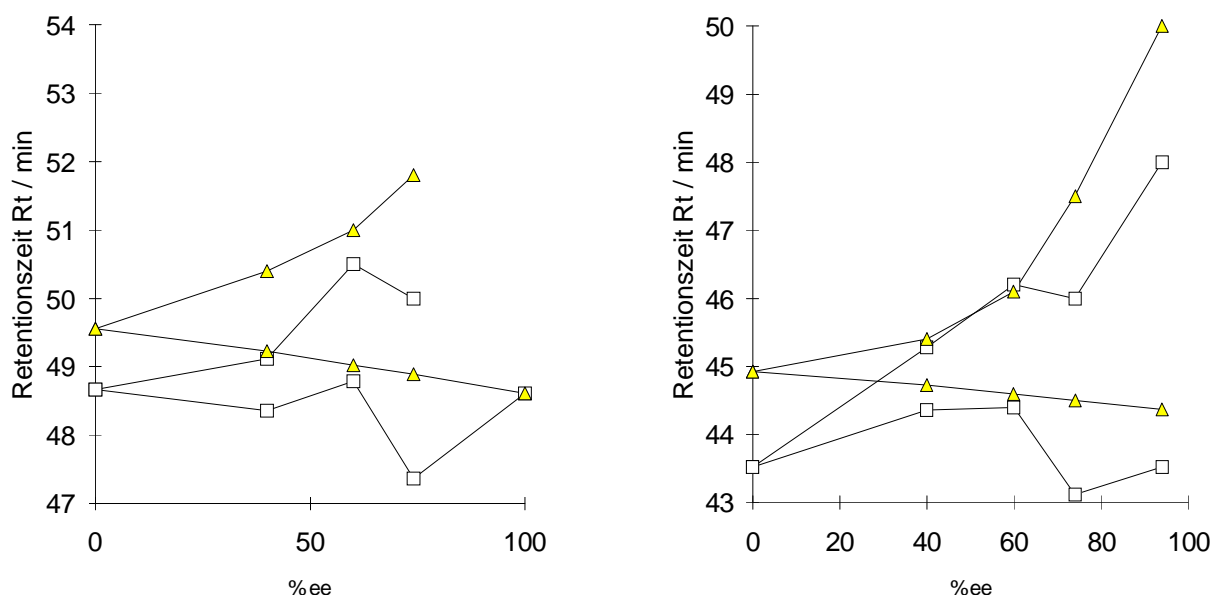
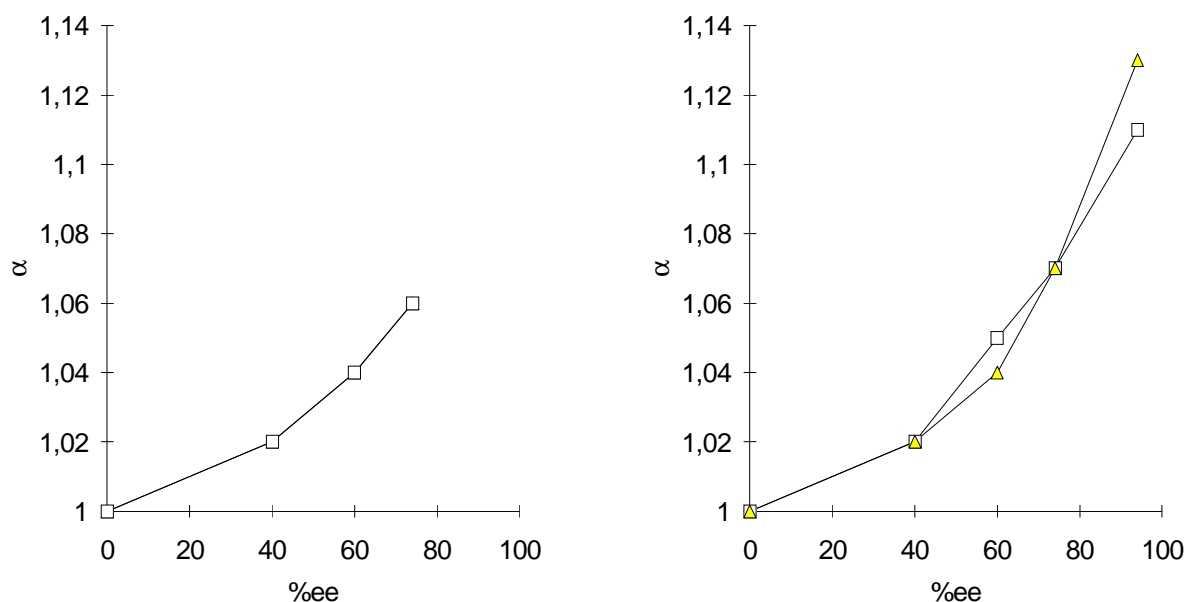


Abb 88 : Auftragung der relativen Retentionen gegen die optische Reinheit

Aufgabe von 20  $\mu$ g N-Benzoyl-alaninmethylester    Aufgabe von 100  $\mu$ g N-Benzoyl-alaninmethylester



Legende Abb 87 und 88:    —□— experimentelle Daten    —△— aus Simulationen erhaltene Daten

Abbildung 89 :

N-Benzoyl-phenylalaninmethylester

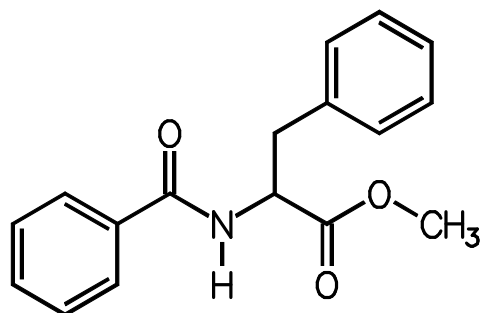
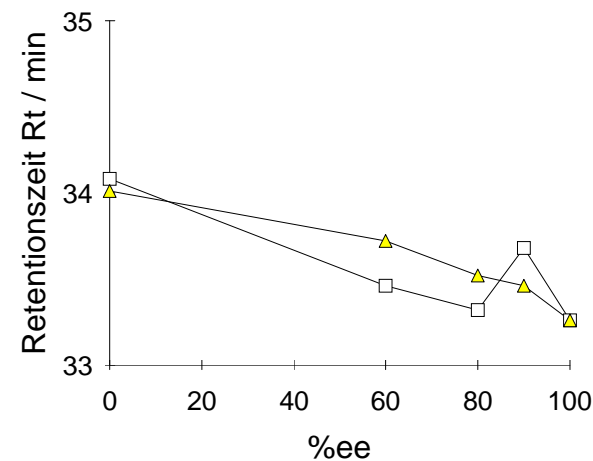


Abb. 90 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg N-Benzoyl-phenylalaninmethylester



—□— experimentelle Daten      —▲— aus Simulationen erhaltene Daten

Tabelle 43 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*20	100	33.26	-	10.26	-	2.96	-	33.26	-	10.26	-	2.96	-
*20	0	-	34.08	10.51	-	2.96	-	-	34.01	10.48	-	2.96	-
20	60	33.46	-	10.30	-	2.96	-	33.72	-	10.39	-	2.96	-
20	80	33.32	-	10.26	-	2.96	-	33.52	-	10.32	-	2.96	-
20	90	33.68	-	10.38	-	2.96	-	33.46	-	10.30	-	2.96	-
100	80	31.34	33.	9.51	10.01	2.98	1.06	31.01	33	9.47	10.15	2.96	1.07

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

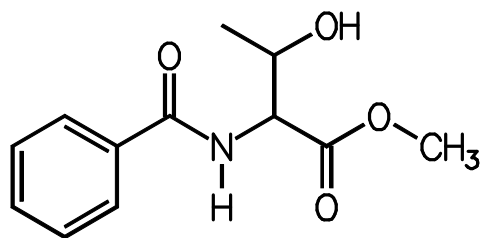
Parametersatz:

k<sub>(RR)</sub> : 8.2158Km<sub>(RR)</sub> : 9.0 10<sup>3</sup> l/molk<sub>(RS)</sub> : 8.2158Km<sub>(RS)</sub> : 6.5 10<sup>3</sup> l/molk<sub>(R)</sub> : 11.5

β : 1

Bodenzahl: 1500

Abbildung 91 :



N-Benzoyl-threoninmethylester

Tabelle 44 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-threoninmethylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
20	100	*30.49 30.44		9.16 9.15		3.		30.49	9.16			3.	
20	0		*30.88	9.96		2.82			31.66	9.55		3.	
20	40	30.99	31.42	9.33	9.47	3.	1.02	31.1	31.8	9.36	9.6	3.	1.03
20	60	31.04	32.46	9.35	9.82	3.	1.05	30.90	32.5	9.30	9.83	3.	1.06
20	80	31.13	33.21	9.38	10.07	3.	1.07	30.68	33.3	9.23	10.1	3.	1.09
20	90	30.97	33.8	9.32	10.27	3.	1.10	30.58	34	9.19	10.33	3.	1.12
100	80	28.84	31.2	8.61	9.4	3.	1.09	29.03	31.2	8.67	9.40	3.	1.08

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	8.2928	$k_{(RS)}$ :	9.1667
$k_{(R)}$ :	15.6667		
$Km_{(RR)}$ :	4.0 10 <sup>5</sup> l/mol	$Km_{(RS)}$ :	7 10 <sup>5</sup> l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	1500

Abbildung 92 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20  $\mu\text{g}$  N-Benzoyl-threoninmethylester

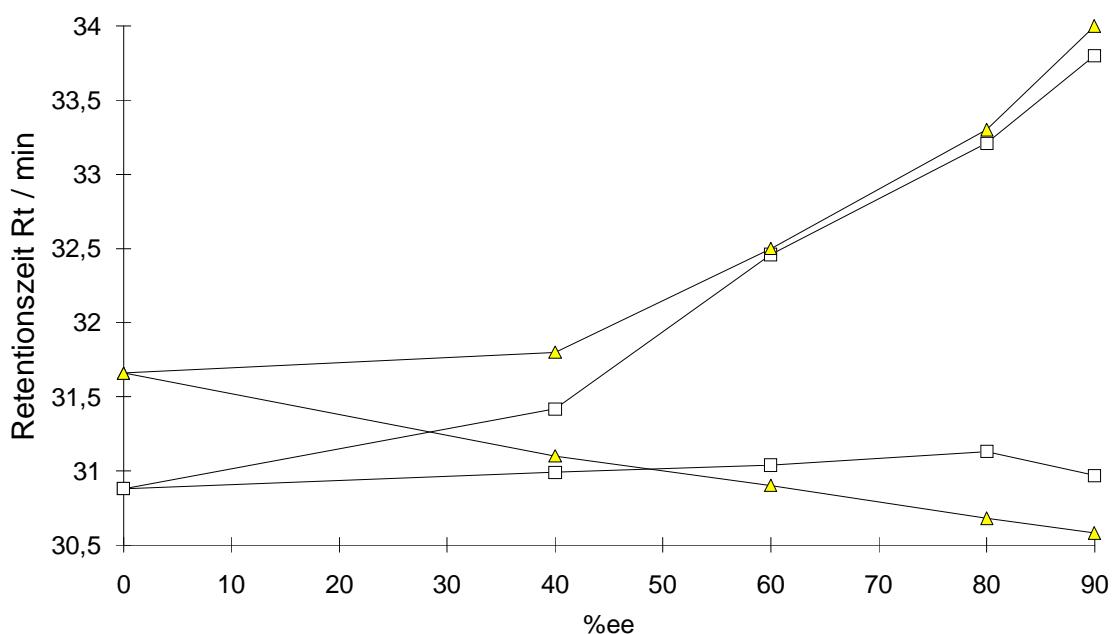
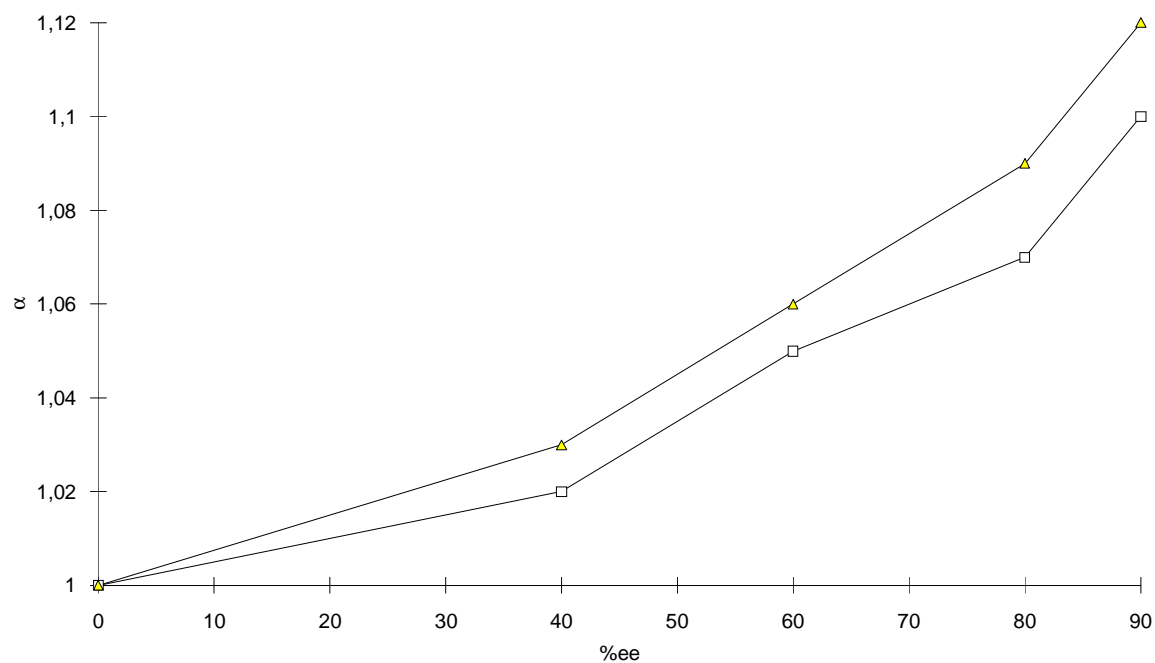


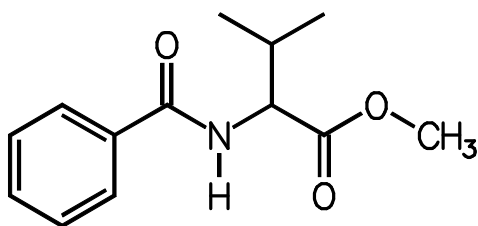
Abbildung 93 : Auftragung der relative Retentionen gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20  $\mu\text{g}$  N-Benzoyl-threoninmethylester



Legende Abb. 92 und 93 : —□— experimentelle Daten —▲— aus Simulationen erhaltene Daten



Abbildung 94 :



N-Benzoyl-valinmethylester

Tabelle 45 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-Benzoyl-valinmethylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimenteller Peak Rt <sub>max</sub> /min	k' <sub>1</sub>	t <sub>0</sub> /min	simulierter Peak Rt <sub>max</sub> /min	k' <sub>1</sub>	t <sub>0</sub> /min
*20	100	16.75	4.66	2.96	16.75	4.66	2.96
*20	0	16.78	4.67	2.96	16.79	4.67	2.96
20	60	16.88	4.70	2.96	16.78	4.67	2.96
20	80	16.94	4.72	2.96	16.77	4.67	2.96
20	90	16.96	4.73	2.96	16.76	4.67	2.96
100	80	16.32	4.48	2.98	16.10	4.44	2.96

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$  : 4.2244

$k_{(RS)}$  : 4.2244

$k_{(R)}$  : 5.2500

$Km_{(RR)}$  :  $1.0 \cdot 10^4$  l/mol

$Km_{(RS)}$  :  $1.7 \cdot 10^4$  l/mol

$\beta$  : 1

Bodenzahl: 1500

Abbildung 95 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg Benzoyl-valinmethylester

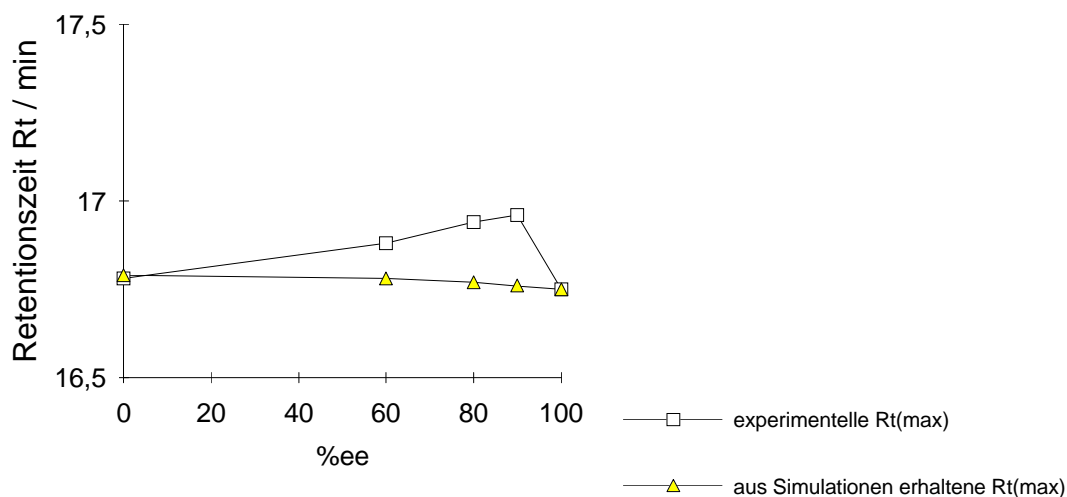
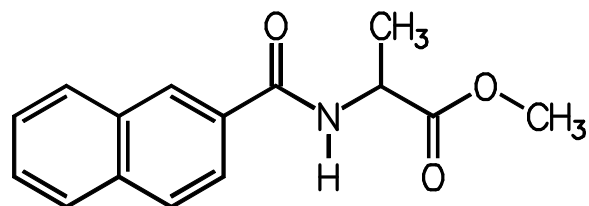


Abbildung 96 :



N-2-Naphthoyl-alaninmethylester

Tabelle 46 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des N-2-Naphthoyl-alaninmethylesters

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*20	100	24.58		7.19		3.		24.58		7.19		3.	
*20	0		25.32	7.44		3.			25.39	7.46		3.	
20	60	25.86	26.6	7.62	7.87	3.	1.03	24.84	26.5	7.28	7.83	3.	1.08
20	80	26.10	27.5	7.70	8.17	3.	1.06	24.70	27.5	7.23	8.17	3.	1.13
20	90	26.10	29	7.70	8.67	3.	1.13	24.64	28.6	7.21	8.53	3.	1.18
100	60	23.60	24.94	6.87	7.31	3.	1.07	23.6	24.7	6.87	7.23	3.	1.05

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	6.5362	$k_{(RS)}$ :	7.1667
$k_{(R)}$ :	9.8333		
$Km_{(RR)}$ :	9.0 10 <sup>4</sup> l/mol	$Km_{(RS)}$ :	6.0 10 <sup>4</sup> l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	2500

Abbildung 97 : Auftragung der Retentionszeiten gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg N-2-Naphthoyl-alaninmethylester

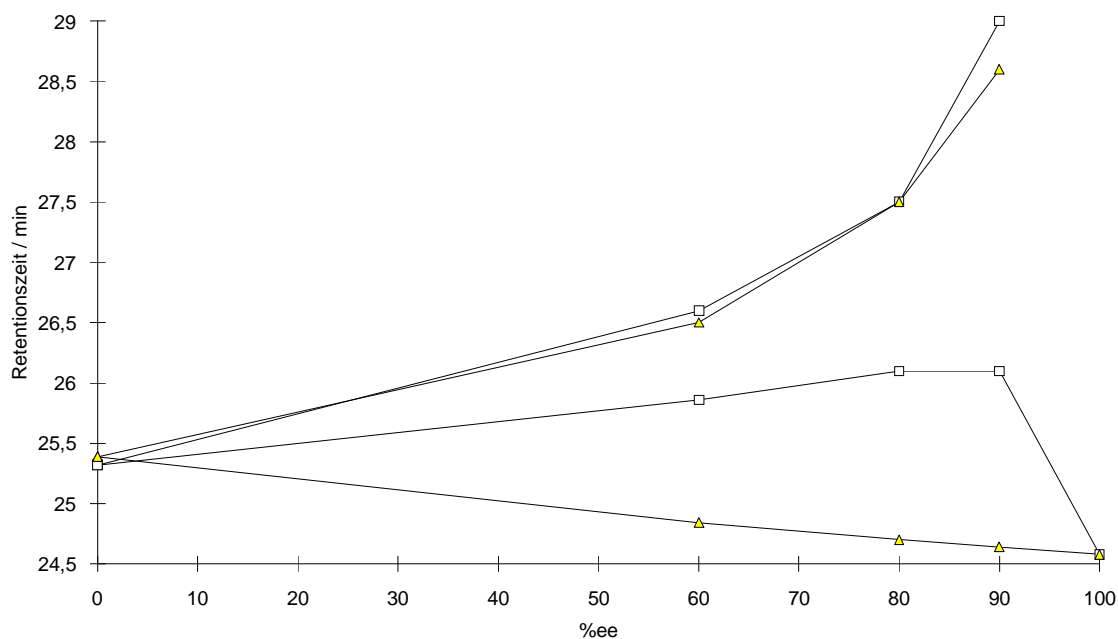
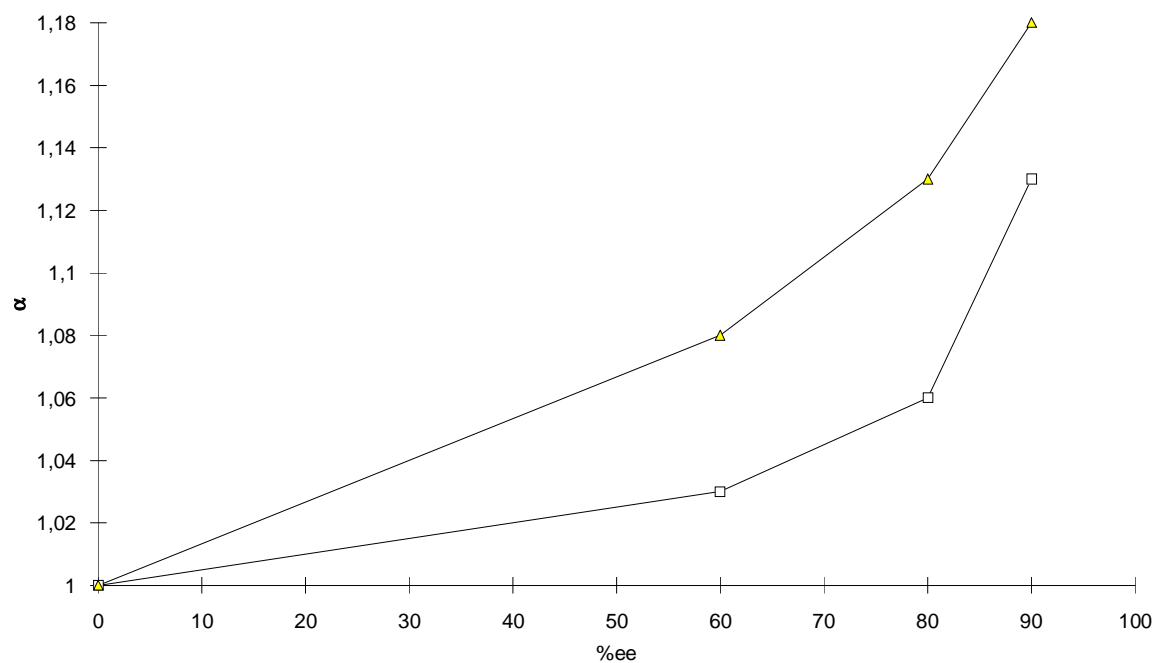


Abbildung 98 : Auftragung der relative Retentionen gegen die optische Reinheit bei einer Aufgabe von 20 µg N-2-Naphthoyl-alaninmethylester



Legende Abb. 97 und 98 :

—□— experimentelle Daten      —▲— aus Simulationen erhaltene Daten

Bei dem Vergleich der Retentionszeiten der experimentellen und der simulierten Chromatogramme ist zu beachten, daß die experimentellen Retentionszeiten sehr stark von äußeren Faktoren abhängen (wie z.B.: Temperaturschwankungen, Fließmittelzufuhr, Vorgeschiebe der Säule etc.). Deswegen können die bestimmten Retentionszeiten durchaus um 1 bis 2 min variieren. Zusätzlich wird die genaue Bestimmung dadurch erschwert, daß keine digitalisierten Daten benutzt werden konnten, sondern auf Chromatogrammausdrucke zurückgegriffen werden mußte. Wegen der Unzulänglichkeiten des verwendeten Thermoplotters (z.B. Nichtlinearität der Zeitachse, Diskrepanz zwischen numerischen und graphischen Retentionszeitmaxima, ungenaue Angabe der Totzeit) resultiert ein weiterer Fehlerbereich. Obwohl gewisse Unterschiede zwischen den gemessenen und den simulierten Retentionszeiten auftreten, werden die relativen Retentionen  $\alpha$  sehr gut durch die simulierten Chromatogramme wiedergegeben.

Wie eine Durchsicht der Abbildungen A28-A87 und der Tabellen 38-46 zeigt, ist trotz der geschilderten Probleme eine exzellente Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment zu beobachten. Nur für ein einziges Chromatogramm ist eine angemessene Simulation nicht gelungen (N-Benzoyl-leucinmethylester 100 µg, 80 %ee Abb. A51). Da aber alle anderen gerechneten Trennungen dieser Verbindung sehr gut mit dem Experiment übereinstimmen, wäre eine erneute Vermessung dieser Probe angebracht.

Für die weiteren Untersuchungen werden die Gleichgewichtskonstanten der Dimerisierung in der stationären Phase benötigt. In Tabelle 47 sind alle Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren aller N-Acyl-Aminosäureester zusammengestellt, die für die Simulationen verwendet wurden. Tabelle 48 enthält die nach Gleichung (45) in freie Energien umgerechneten Werte.

Tabelle 47 : Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren der Chromatogrammsimulationen

	$K_{m(RR)}$ /(l/mol)	$K_{m(RS)}$ /(l/mol)	$K_{s(RR)}$ /(l/mol)	$K_{s(RS)}$ /(l/mol)	$k_{(RR)}$	$k_{(RS)}$	$k_{(R)}$
bb	$8.00 \cdot 10^4$	$5.47 \cdot 10^3$	$6.00 \cdot 10^4$	$4.38 \cdot 10^3$	11.55	12.33	13.00
be	$1.00 \cdot 10^5$	$8.13 \cdot 10^3$	$7.00 \cdot 10^4$	$5.69 \cdot 10^3$	6.59	6.59	9.00
bi	$2.00 \cdot 10^5$	$2.14 \cdot 10^4$	$1.00 \cdot 10^5$	$1.07 \cdot 10^4$	4.75	4.75	6.67
bl	$2.00 \cdot 10^4$	$1.50 \cdot 10^3$	$2.00 \cdot 10^4$	$1.50 \cdot 10^3$	8.24	8.24	10.49
bm	$3.00 \cdot 10^4$	$1.00 \cdot 10^3$	$3.00 \cdot 10^4$	$1.00 \cdot 10^3$	12.88	12.88	19.34
bp	$9.00 \cdot 10^3$	$5.59 \cdot 10^2$	$6.50 \cdot 10^3$	$4.04 \cdot 10^2$	8.22	8.22	11.50
bt	$4.00 \cdot 10^5$	$1.35 \cdot 10^4$	$7.00 \cdot 10^5$	$2.61 \cdot 10^4$	8.29	9.17	15.67
bv	$1.00 \cdot 10^4$	$1.53 \cdot 10^3$	$1.70 \cdot 10^4$	$2.61 \cdot 10^3$	4.22	4.22	5.25
cn	$9.00 \cdot 10^4$	$6.08 \cdot 10^3$	$6.00 \cdot 10^4$	$4.45 \cdot 10^3$	6.54	7.17	9.38

Tabelle 48 : Aus den Gleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren der Chromatogrammsimulationen berechnete freie Energien

	$\Delta G_{m(RR)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{s(RR)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{m(RS)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{s(RS)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{k(RR)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{k(RS)}$ /(kcal/mol)	$\Delta G_{k(R)}$ /(kcal/mol)
bb	-6.69	-5.10	-6.52	-4.97	-1.45	-1.49	-1.52
be	-6.82	-5.33	-6.61	-5.12	-1.12	-1.12	-1.30
bi	-7.23	-5.91	-6.82	-5.50	-0.92	-0.92	-1.12
bl	-5.87	-4.33	-5.87	-4.33	-1.25	-1.25	-1.39
bm	-6.11	-4.09	-6.11	-4.09	-1.51	-1.51	-1.76
bp	-5.40	-3.75	-5.20	-3.56	-1.25	-1.25	-1.45
bt	-7.64	-5.64	-7.97	-6.03	-1.25	-1.31	-1.63
bv	-5.46	-4.35	-5.77	-4.66	-0.85	-0.85	-0.98
cn	-6.76	-5.16	-6.52	-4.98	-1.11	-1.17	-1.35

#### 4.3.2. Berechnung von Aggregaten der N-Acyl-Aminosäureester

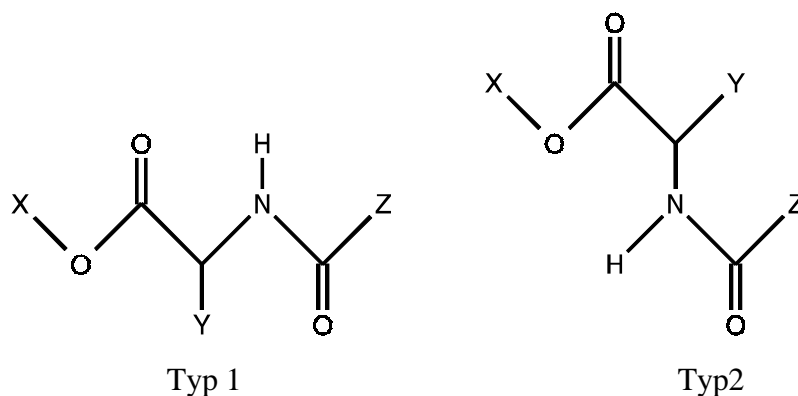
Entsprechend der im Kapitel 3.1 erläuterten und im Kapitel 4.1.2 am Beispiel des Binaphthols durchgeführten Vorgehensweise werden nun die zur Beschreibung der Enantiomeren-überschußabtrennung der N-Acyl-Aminosäureester notwendigen Komplexe vorgestellt. Es wurde lediglich zur Ermittlung der Minimumsgeometrien der einzelnen Aminosäureester auf die Kraftfeldverfahren zurückgegriffen. Wie es schon in der allgemeinen Diskussion zur Wiedergabe intermolekularer Wechselwirkungen durch die einzelnen Verfahren erklärt und gefordert wurde (Kapitel 3.3), werden alle intermolekularen Wechselwirkungen nur mit Hilfe des AM1-Verfahrens berechnet.

Zur Ermittlung der globalen Minimumsgeometrien werden, ausgehend von einer voroptimierten Struktur, sämtliche relevanten Bindungen in sechs 60°-Schritten gedreht, es sei denn, daß der sie beschreibende Torsionswinkel vom Kraftfeld als planar definiert ist. In diesem Fall reicht eine 180°-Drehung dieser Bindung aus. Die so erzeugten Konformere (bei manchen Verbindungen weit über 50000, z. B. N-Benzoyl-threoninmethylester) werden geometrieoptimiert und mit dem im Macromodel-Programmpaket [31] enthaltenen Sortieralgorithmus auf Identität überprüft.

Im Falle der semiempirischen Methoden werden die aus allen drei Kraftfeld-Verfahren sich ergebenden Konformationen als Ausgangsstrukturen angenommen und semiempirisch geometrieoptimiert. Die berechneten Geometrien werden dann wiederum mit dem Macromodel-Sortieralgorithmus aufgearbeitet.

Von besonderem Interesse ist, welche der beiden in Abbildung 99 aufgeführten Geometrien die niedrigste Energie hat. Diese beiden durch prinzipiell unterschiedliche intramolekulare Wechselwirkungen geprägten Konformationen führen auch zu gänzlich verschiedenen Ansätzen in der Berechnung der in Kapitel 4.3.1. angenommenen Dimere.

Abbildung 99 : Prinzipielle Konformationen der Aminosäureester



Die diversen, in Abbildung 76 definierten Torsionswinkel der mit den verschiedenen Verfahren ermittelten globalen Minimumsstrukturen sind in Tabelle 49 zusammengestellt. Der Torsionswinkel t6 verdient besonderes Augenmerk, da er die in Abbildung 99 dargestellten Unterschiede widerspiegelt. Es fällt als erstes auf, daß alle semiempirischen Verfahren für das globale Minimum eine fast identische Konformation erhalten.

Tabelle 49 : Vergleich der in Abbildung 76 definierten Torsionswinkel der verschiedenen Aminosäureester

Verbindung/ Verfahren	Torsions- winkel t1 /°	Torsions- winkel t2 /°	Torsions- winkel t3 /°	Torsions- winkel t4 /°	Torsions- winkel t5 /°	Torsions- winkel t6 /°
bb_am1	178,7	153,9	-109	172,4	138,9	26,1
bb_pm3	177,4	151,2	-82,7	164,4	118,1	28,4
bb_mndo	-178,3	146	-78,3	172	-95,3	37,5
bb_mm2	-166,3	72,8	-97,1	171,5	156,2	-17,3
bb_mm3	179,9	-1,6	-161,4	179,5	171,1	-162,4
bb_amber	176,6	165,9	-167,7	-179,1	-163,2	-2,5
be_am1	180	155,9	-109,4	172,1	138,9	26,1
be_pm3	179,6	148,5	-84,7	171,8	149,6	30
be_mndo	-178,8	140,2	-101,8	-178,4	-106,8	27
be_mm2	-179,8	59,3	-97,1	177,5	-158,8	-32,3
be_mm3	-179,9	-0,8	-161,3	-179,9	172	-160,5
be_amber	180	165,6	-167,5	-179,1	-163,2	-2,6
bi_am1	179,7	155,2	-109,7	172	139	25,3
bi_pm3	176	140,2	-78,4	174,3	152,5	28,8
bi_mndo	-175	114,8	-110,3	-176,6	-97,7	10
bi_mm2	-178,3	60,4	-96,8	177,4	-158,7	-31,3
bi_mm3	179,4	-1,4	-161,3	-180	171,9	-161,2
bi_amber	179,7	165,7	-167,5	-179,1	-163,2	-2,6
bl_am1	179,7	154,2	-117,2	173,6	140,7	23,3
bl_pm3	-178,5	127,3	-94,2	178,9	154,9	18
bl_mndo	-178,6	142,8	-100,8	176,8	-101,3	28
bl_mm2	179,7	60,3	-100,9	179,7	-157,4	-32,7
bl_mm3	179,6	124,1	-156,9	-179,3	170,3	-18,8
bl_amber	-179,7	148,7	-164,3	-178,9	-162,8	-11,8

Fortsetzung Tabelle 49

Verbindung/ Verfahren	Torsions- winkel t1 /°	Torsions- winkel t2 /°	Torsions- winkel t3 /°	Torsions- winkel t4 /°	Torsions- winkel t5 /°	Torsions- winkel t6 /°
bm_am1	179,7	155,6	-109,5	172,2	138,9	26,4
bm_pm3	-176,6	128,6	-83	175,7	155,6	23,2
bm_mndo	-173,1	131	-102	179,6	-103,8	21,5
bm_mm2	179,6	63,2	-98,5	178,2	-159,1	-29,7
bm_mm3	179,4	-1,4	-161,3	-180	171,9	-161,2
bm_amber	-180	165,5	-167,5	-179,1	-163,2	-2,7
bp_am1	-179,9	151,1	-105,3	176,2	-143,2	27,9
bp_pm3	178,9	159	-87,7	174	153,2	41,1
bp_mndo	-176,7	117,3	-103,5	-179,9	-94,5	15,1
bp_mm2	-175,1	-22,9	-86,2	177,7	-160	-154,4
bp_mm3	179,4	-1,4	-161,3	-180	171,9	-161,2
bp_amber	-180	173	-171,2	-175,1	-158,3	2,8
bt_am1	-179,3	106,2	-119,4	-175,8	-141,1	5,1
bt_pm3	-179,2	165,2	-84,1	174,5	153,5	44,7
bt_mndo	-175,8	84,8	-115,9	-178,8	-98,2	-9
bt_mm2	179,8	44,6	53,5	177,4	-160	136,9
bt_mm3	-179,7	-0,8	-169,2	179,8	-170,4	-175,5
bt_amber	-179,8	165,3	-168,4	180	-163,5	-3,7
bv_am1	-179,9	152,7	-105,2	172,7	138,8	28,9
bv_pm3	-179,5	114,9	-92	177,8	154,5	9,9
bv_mndo	-176,7	122,2	-108,3	179,6	-103,7	16,2
bv_mm2	-176,6	-17,7	-84,9	178,5	-159,3	-144,1
bv_mm3	180	121,7	-135,3	179,9	172,1	-6,3
bv_amber	-179,7	151,1	-164,4	-178,2	-162,6	-9,4
cn_am1	179,8	155,6	-109,5	172,2	138,7	26,4
cn_pm3	180	156,1	-81,5	163,8	117,8	32,1
cn_mndo	-176,9	148,4	-78,5	172,5	88,3	39,3
cn_mm2	179,7	62,7	-98,3	178,2	-158,7	-30
cn_mm3	-179,9	-0,8	-161,2	-161,2	-161,2	-159,6
cn_amber	180	165,4	-167,6	-179,1	-158,8	-3



Die gefundene Konformationsgeometrie entspricht der des Typs 1 in Abbildung 99. Den gleichen Strukturtyp ermittelt auch das AMBER-Verfahren. Da dieses Kraftfeld speziell zur Berechnung von Proteinen entwickelt wurde, können diese Resultate als Bestätigung der semiempirischen Methoden aufgefaßt werden. Dagegen berechnen das MM2- und MM3-Verfahren die globalen Minimumskonformationen uneinheitlich. Die Geometrien wechseln nicht nachvollziehbar zwischen den Strukturtypen 1 und 2. Wie Testrechnungen ergeben, ist für die verschiedenen Aminosäureester dieser Konformationswechsel der Minimumsgeometrien auf die energetisch fast gleiche Bewertung der beiden möglichen intramolekularen Wasserstoffbrücken durch die Macromodelversionen dieser Kraftfelder zurückzuführen. Die Konkurrenz der beiden Wasserstoffbrückenbindungen bedingt auch die geringen Energieunterschiede zwischen den berechneten Strukturtypen 1 und 2.

Tabelle 50 : Bildungsenthalpien der N-Acyl-Aminosäureester berechnet mit dem AM1-Verfahren

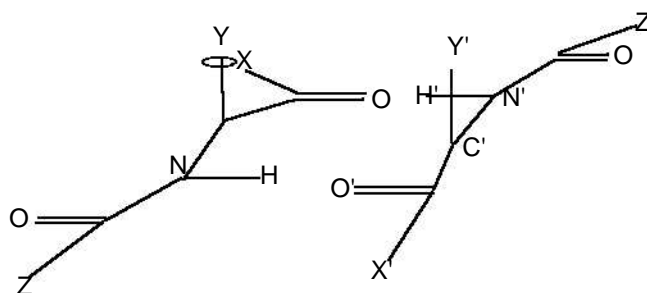
	Bildungsenthalpie H /(kcal/mol)
bb	-72.78
be	-106.91
bi	-110.87
bl	-118.38
bm	-100.97
bp	-73.54
bt	-152.69
bv	-111.67
cn	-82.30

Mit den in Tabelle 50 aufgeführten Bildungsenthalpien der einzelnen Aminosäureester, wie sie das AM1-Verfahren als globale Minima berechnet, wird die Diskussion der Monomer-geometrien abgeschlossen.

Die nun folgend dargestellten Dimere basieren auf AM1-Rechnungen, ausgehend von den Minimumsgeometrien. Die auf dem Strukturtyp 2 oder auf Mischformen von 1 und 2 beruhenden Komplexe ergeben bedeutend ungünstigere Dimerisierungsenergien oder aber die Komplexe sind instabil; das heißt: sie gehen im Laufe der Geometrieoptimierung in Assoziate über, deren Monomere dem Strukturtyp 1 angehören.

Der prinzipielle Unterschied der homochiralen und der heterochiralen Dimere läßt sich folgendermaßen erklären. Im Falle der homochiralen Assoziate kann ausgehend von zwei deckungsgleichen Monomeren ein zur Dimerenbildung befähigtes Aggregat gebildet werden, indem man eines der Ausgangsmonomere (Index ' )  $180^\circ$  um die C-Y Bindung dreht und dann entsprechend der schematischen Darstellung in Abbildung 100 räumlich verschiebt.

Abbildung 100 : Schematische Darstellung des homochiralen Dimers



Zur Bildung eines heterochiralen Dimers muß eines der Monomere gespiegelt werden, z.B. das Monomer ( ' ) an der durch die O' , N' und H' Atome definierten Ebene (siehe Abbildung 101). Bei den homochiralen Dimeren zeigen dann die beiden "C-Y Bindungen" in die gleiche Richtung, während sie im heterochiralen Dimer entgegengesetzt orientiert sind. Für das heterochirale Assoziat ist unter Vernachlässigung der Y-Substituenten eine Wechselwirkungsgeometrie wie im Falle des homochiralen Dimers nur dann erreichbar, wenn eines der Monomere die Minimumsgeometrie verläßt und eine andere Konformation einnimmt.

Abbildung 101 : Schematische Darstellung des heterochiralen Dimers

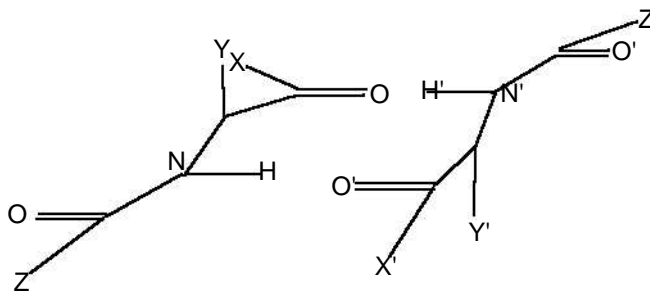


Abbildung 102 : N-Benzoyl-alaninbenzylester-Dimer

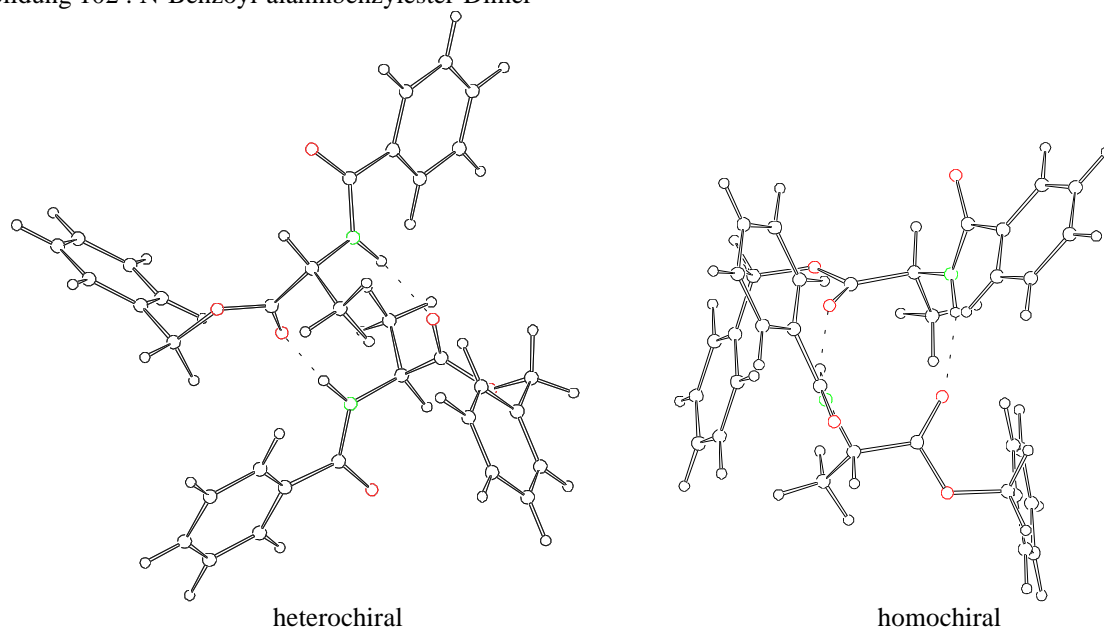


Tabelle 51a : Gesamtenergie des Komplexes H, Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub> und Wechselwirkungsenergie W<sub>A</sub>

Substruktur	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)			W <sub>A</sub> / (kcal/mol)
	Gesamt	As1	As2	Gesamt
bbsr	-150,52	-71,99	-71,42	-7,11
bbss	-152,04	-72,23	-72,23	-7,57
besr	-219,49	-106,06	-106,39	-7,04
bess	-220,61	-106,33	-106,33	-7,95

Tabelle 51b : Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)		
	Gesamt	As1	As2
bbsr	-4,96	0,79	1,36
bbss	-6,48	0,55	0,55
besr	-5,67	0,85	0,52
bess	-6,79	0,58	0,58

Abbildung 103 : N-Benzoyl-alaninethylester-Dimer

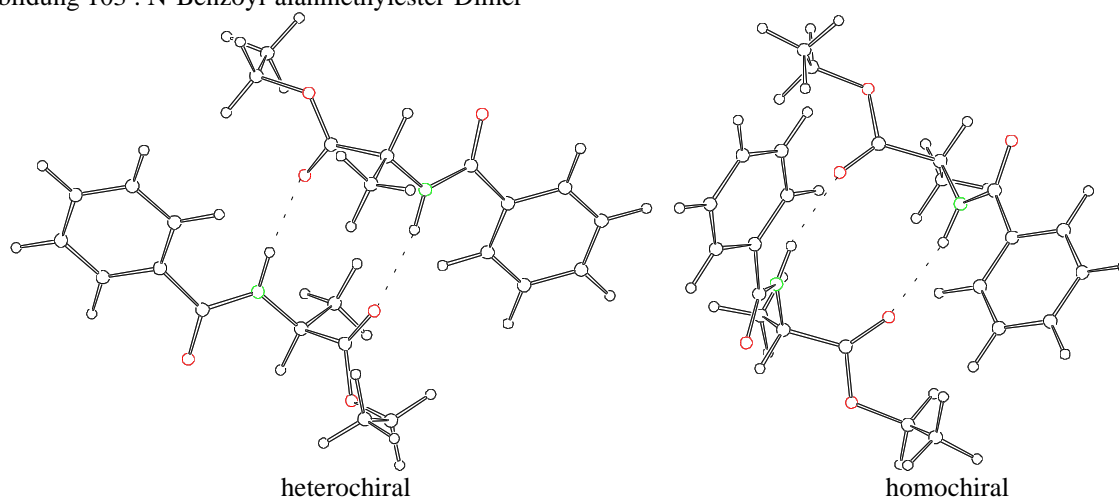


Abbildung 104 : N-Benzoyl-alaninisopropylester-Dimer

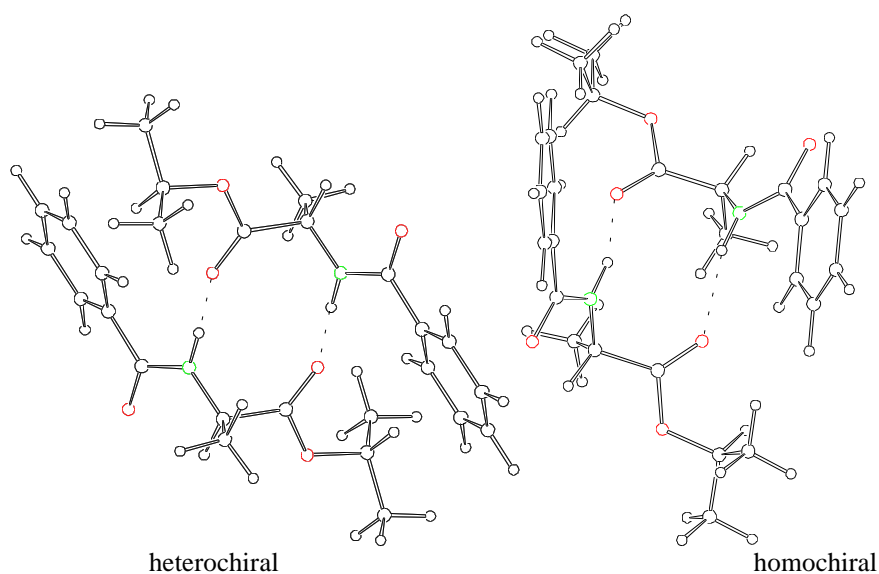


Tabelle 52a : Gesamtenergie des Komplexes H, Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub> und Wechselwirkungsenergie W<sub>A</sub>

Substruktur	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)			W <sub>A</sub> / (kcal/mol)
	Gesamt	As1	As2	Gesamt
bisr	-228,19	-110,1	-110,1	-7,99
biss	-229,03	-109,98	-109,98	-9,07
blsr	-242,25	-117,3	-117,72	-7,23
blss	-242,88	-117,78	-117,78	-7,33

Tabelle 52b : Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)		
	Gesamt	As1	As2
bisr	-6,45	0,77	0,77
biss	-7,29	0,89	0,89
blsr	-5,49	1,08	0,66
blss	-6,12	0,6	0,6

Abbildung 105 : N-Benzoyl-leucinmethylester-Dimer

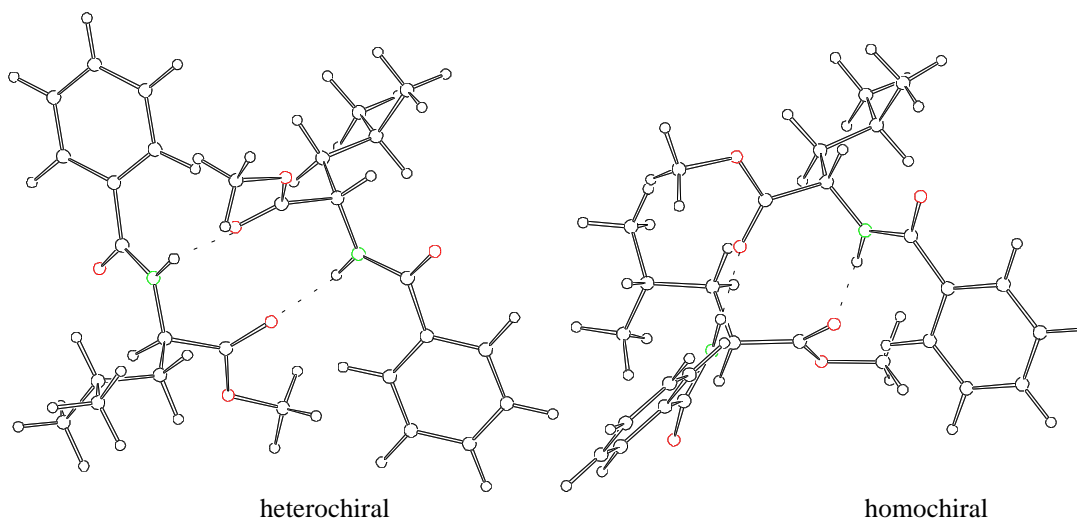


Abbildung 106 : N-Benzoyl-alaninmethylester-Dimer

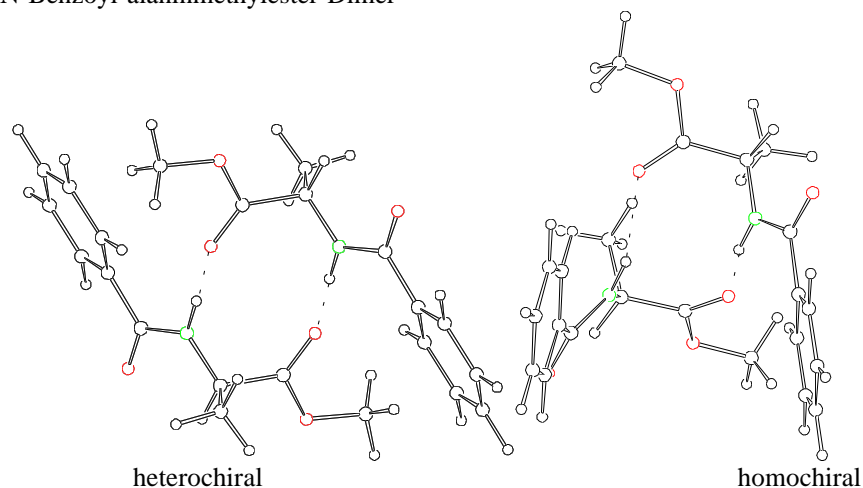


Tabelle 53a : Gesamtenergie des Komplexes H, Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub> und Wechselwirkungsenergie W<sub>A</sub>

Substruktur	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)			W <sub>A</sub> / (kcal/mol)
	Gesamt	As1	As2	Gesamt
bmsr	-208,42	-100,24	-100,24	-7,94
bmss	-208,8	-100,07	-100,07	-8,66
bpsr	-152,87	-72,3	-72,23	-8,33
bpss	-153	-72,23	-72,19	-8,58

Tabelle 53b : Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)		
	Gesamt	As1	As2
bmsr	-6,48	0,73	0,73
bmss	-6,86	0,9	0,9
bpsr	-5,79	1,24	1,31
bpss	-5,92	1,31	1,35

Abbildung 107 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Dimer

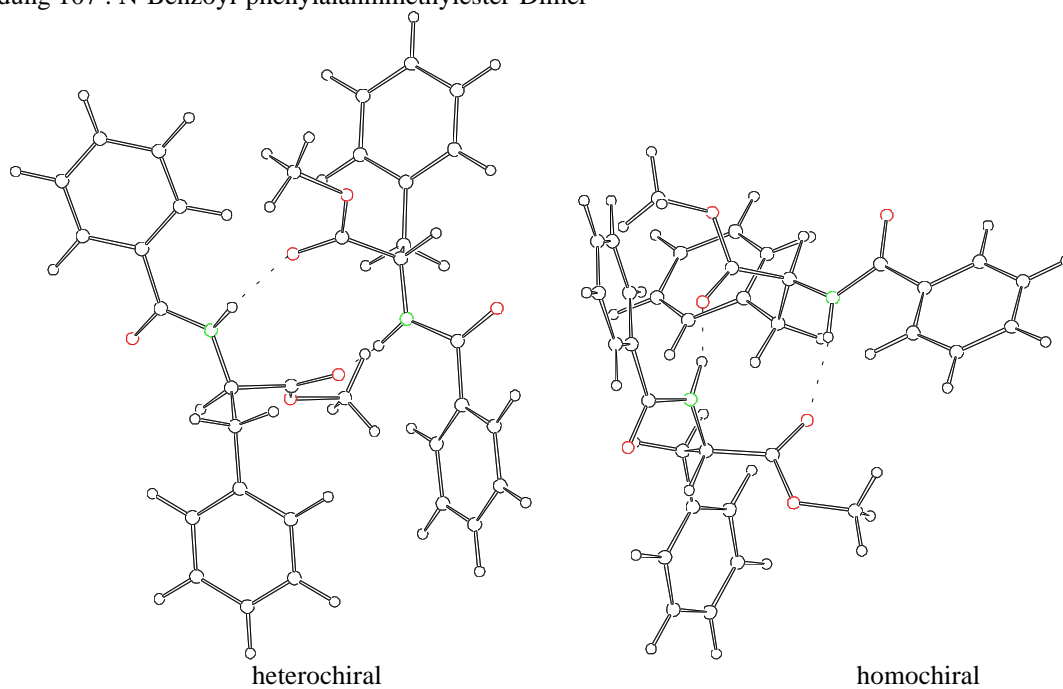


Abbildung 108 : N-Benzoyl-threoninmethylester-Dimer

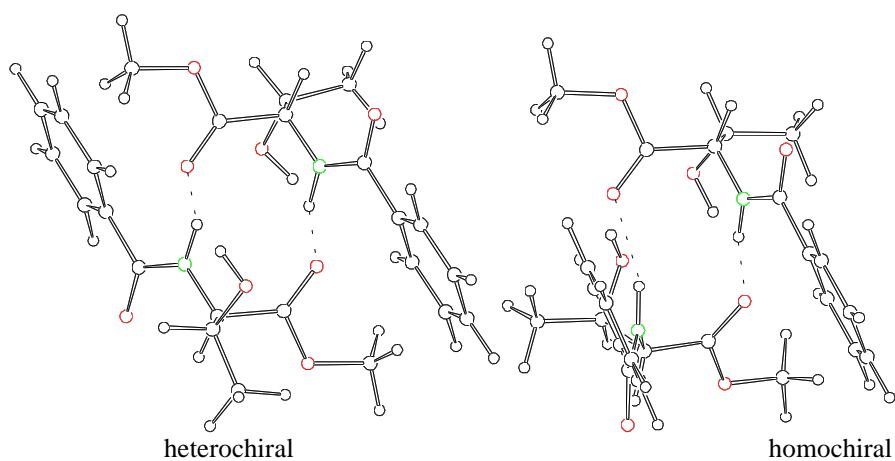


Tabelle 54a : Gesamtenergie des Komplexes H, Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub> und Wechselwirkungsenergie W<sub>A</sub>

Substruktur	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)			W <sub>A</sub> / (kcal/mol)
	Gesamt	As1	As2	Gesamt
btsr	-314,71	-150,01	-150,01	-14,69
btss	-313,45	-149,17	-149,17	-15,11
bvsr	-229,84	-111,01	-111,01	-7,81
bvss	-229,84	-110,89	-110,89	-8,05

Tabelle 54b : Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)		
	Gesamt	As1	As2
btsr	-9,33	2,68	2,68
btss	-8,07	3,52	3,52
bvsr	-6,5	0,66	0,66
bvss	-6,5	0,78	0,78

Abbildung 109 : N-Benzoyl-valinmethylester-Dimer

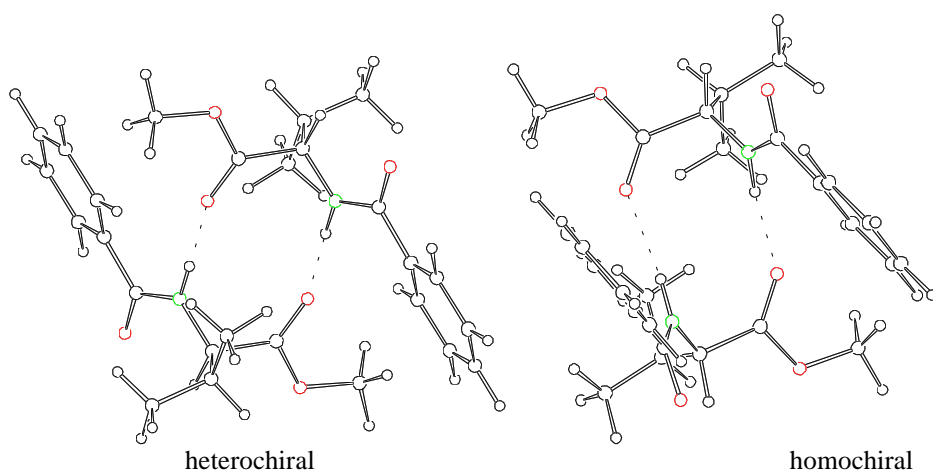


Abbildung 110 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Dimer

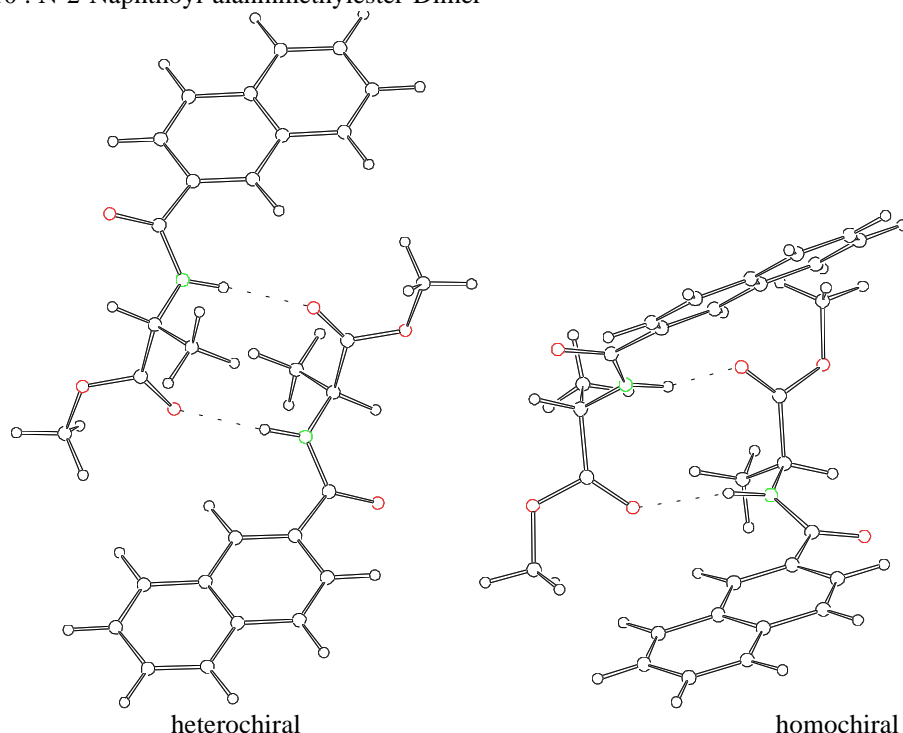


Tabelle 55a : Gesamtenergie des Komplexes H, Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub> und Wechselwirkungsenergie W<sub>A</sub>

Substruktur	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)			W <sub>A</sub> / (kcal/mol)
	Gesamt	As1	As2	Gesamt
cnsr	-171,02	-80,97	-80,97	-9,08
cnss	-171,66	-81,4	-81,4	-8,87

Tabelle 55b : Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)		
	Gesamt	As1	As2
cnsr	-6,42	1,33	1,33
cnss	-7,06	0,9	0,9

Es konnte keine Korrelation zwischen dem Dimerabstand (siehe Tabelle 56, Abstand d1, d2) oder der Planarität der Wasserstoffbrückenheteroatome (siehe Tabelle 56, Torsionswinkel t7) und der Wasserstoffbrückenbindungsstärke festgestellt werden. Die Differenz der heterochiralen und homochiralen Dimerisierungsenergien ist hauptsächlich in den unterschiedlichen Konformationen, die zur optimalen Wechselwirkung führen, begründet.

Bei höherer Stabilität der homochiralen Dimere versuchen die Monomere im entsprechenden heterochiralen Assoziat durch einen Konformationswechsel eine den homochiralen Komplexen vergleichbare Wechselwirkungsgeometrie zu erreichen. Wie schon zum Schema der Abbildung 101 erläutert wurde, muß hierzu mindestens eines der Monomere im heterochiralen Komplex die Minimumsgeometrie verlassen. Diese Hypothese wird auch durch die AM1-Rechnungen bestätigt. In der Tabelle 56 sind zum Vergleich die in den berechneten Dimer-geometrien vorgefundenen Torsionswinkel t1-t6 und t1' -t6' aufgeführt. Diese Konkurrenz zwischen der Ausbildung der energetisch optimalen Wasserstoffbrückengeometrie und den dazu notwendigen Konformationsänderungen bestimmt die Stabilitäten der diastereomeren

Tabelle 56 Vergleich der in Abbildung 70 definierten Torsionswinkel und Abstände der Wasserstoffbrückenheteroatome der verschiedenen Aminosäureester-Dimere

	Torsionswinkel As1						Torsionswinkel As2								
	t1 / °	t2 / °	t3 / °	t4 / °	t5 / °	t6 / °	t1' / °	t2' / °	t3' / °	t4' / °	t5' / °	t6' / °	d1 / Å	d2 / Å	t7 / °
bbss	179,6	163,3	-98,2	176,3	149,9	43,2	179,6	163,3	-98,2	176,3	149,9	43,2	3,17	3,17	-22,6
bbsr	179,1	-146,8	108,4	-178,3	-152,5	-25,9	-179,3	110,6	-115,6	179,3	151,8	-0,5	3,17	3,18	10,5
bess	-179,5	151	-100,2	178,4	152,9	34	-179,5	151	-100,2	178,4	152,8	34	3,16	3,16	-23,2
besr	-179,6	125,4	-111,4	-179,2	154	13,5	179,3	-147,3	102,2	-178,4	-151,5	-30,7	3,17	3,16	10,7
biss	179,1	139,3	-119,7	-176,4	-149,6	25,3	179,1	139,2	-119,8	-176,4	-149,5	25,2	3,08	3,08	-34,5
bisr	178,4	137,1	-118,8	-177,4	-150	21,5	-178,4	-137,1	118,8	177,4	150	-21,5	3,13	3,13	0
blss	179,8	150,3	-112,5	178,2	158,9	30,4	179,8	150,3	-112,5	178,2	158,9	30,4	3,16	3,16	-7
blsr	-179,7	123,9	-107,3	-179,1	155,7	16,4	179	-147,3	99,9	-178,3	-150,5	-33,7	3,16	3,15	11
bmss	179,3	146,3	-117,2	-176,8	-151,1	31,6	179,3	146,3	-117,2	-176,8	-151,1	31,6	3,08	3,08	-34,9
bmsr	179,2	140,1	-117,6	-178,3	-151,4	23,9	-179,2	-140,1	117,6	178,3	151,4	-23,9	3,13	3,13	0
bpss	179,2	117,4	-133,1	-174,2	-147	8,1	178,6	121,6	-112,6	-178,4	161	14,2	3,09	3,16	-20,5
bpsr	-179,7	-106,2	119,2	177,6	-155,5	-0,8	179,2	118,5	-134,2	-173,9	-147,7	8,2	3,15	3,06	-14,1
btss	177,6	149,1	-111,7	-178,1	-151	34	177,6	149,1	-111,7	-178,1	-151	34	3,1	3,1	-40,9
btsr	-178,2	-146,9	112,4	179,2	148,2	-24	178,2	146,9	-112,4	-179,2	-148,2	24	3,17	3,17	0
bvss	-179,3	148,4	-113,4	-179,9	-153	29,3	-179,3	148,4	-113,4	-179,9	-153	29,3	3,17	3,17	-40,2
bvsr	-179,9	143,5	-114,7	-179,6	-154,9	26	179,9	-143,5	114,7	179,6	154,9	-26	3,18	3,18	0
cnss	179,4	140,6	-119,2	-177,2	29,9	25,5	179,4	140,6	-119,1	-177,2	29,9	25,5	3,09	3,09	-29,2
cnsr	178,8	-116,5	119,9	176,2	-33,8	-12,5	-178,8	116,5	-119,8	-176,2	33,9	12,6	3,09	3,09	0

d1: Abstand der Wasserstoffbrückenheteroatome N(As1) O(As2)

d2: Abstand der Wasserstoffbrückenheteroatome N(As2) O(As1)

t7: Torsionswinkel der Atome N(As1) O(As2) N(As2) O(As2)



Nur die heterochiralen Dimere des N-Benzoyl-threoninmethylester und des N-2-Naphthoyl-alaninmethylester weisen höhere Wechselwirkungsenergien als die entsprechenden homochiralen Assoziate auf. Abbildung 110 verdeutlicht die destabilisierende Wirkung des geänderten Carboxylrestes Z im homochiralen Naphthoylderivat. Im Falle des N-Benzoyl-threoninmethylester-Dimers ist der Grund für die geänderte Stabilitätsfolge der diastereomeren Dimere in der weiteren OH-Gruppe, die an dem Wasserstoffbrückensystem teilnehmen kann, zu finden.

Als Ausgangsstrukturen für die Geometrieoptimierung wurden gemäß Abbildung 111 die gewählten Modellsubstanzen an die Dockingstelle I aus 4 Richtungen angenähert. Im Dimer ist diese Position durch das zweite Aminosäurederivat besetzt. Für die Wechselwirkung mit der als A bezeichneten Seite wurden 8 Positionen ausgewählt (siehe Abbildung 111). Jedoch erwiesen sich im Laufe der Geometrieoptimierungen die Wechselwirkungen zu den Positionen A5 und A8 als energetisch instabil und bleiben deshalb im folgendem unberücksichtigt.

136

wobei mit A2 die stabilste Wasserstoffbrückenbindung berechnet wird. Die Komplexbildungsenergie beträgt aber hier nur -3.46 kcal/mol. Dagegen weisen die anderen Aminosäureester-Isopropanol-Komplexe einen Energiegewinn um die -4.7 kcal/mol auf. In den Tabellen<sup>1</sup> C1-C9 (Anhang C) sind die Einzelheiten mit den entsprechenden Minimumsstrukturen (Abbildung C1-C9) aufgelistet.

Die Beschreibung der ermittelten Propylamin-N-Acyl-Aminosäureester-Aggregate hat sich hinsichtlich der Wechselwirkungsenergien als etwas komplexer herausgestellt. Hier tritt als drittes Wechselwirkungsmuster, neben der gleichzeitigen Ausbildung zweier Wasserstoffbrücken zur Seite I (siehe oben), auch eine energetisch äquivalente Wasserstoffbrückenbindung der beiden Propylaminwasserstoffatome zu den Positionen A3 und A6 bzw. A2 und A7 auf. Auch die zweizählige Komplexierung des Propylamins an die Stellen A1 und A4 ist von gewisser Bedeutung. Die Stabilisierung auf Grund der Aggregatsbildung variiert von -3.1 bis zu -3.95 kcal/mol. Es ist hervorzuheben, daß nur der N-Benzoyl-threoninmethylester-Propylamin-Komplex um 0.49 kcal/mol stabiler ist als das entsprechende Alkoholaggregat. Die Einzelheiten können den Tabellen<sup>1</sup> C10-C18 entnommen werden. Die Darstellungen der zugehörigen Minimumsstrukturen sind in den Abbildungen C10-C18 enthalten.

Die gleichzeitige Wechselwirkung zweier Isopropanolmoleküle mit einem Aminosäureester wird in den Tabellen<sup>1</sup> C19-C27 beschrieben. Die sich hieraus ergebenden Minimumsstrukturen werden in den Abbildungen C19-C27 dargestellt. Die Alkoholmoleküle wurden von den beiden Seiten I und A angenähert. Für die Wechselwirkung zur I-Seite ergibt sich die gleiche Bevorzugung der zweifachen Wasserstoffbrücke, wie sie schon bei der Aggregatbildung mit nur einem Alkoholmolekül auftritt. Energetisch gesehen bleiben die Verhältnisse fast unverändert. Der Energiegewinn durch die Komplexbildung beträgt um die -4.6 kcal/mol, der in manchen Fällen bis auf -4.3 kcal/mol reduziert ist. Die Ausbildung der Wasserstoffbrücke zum zweiten Alkohol ergibt erheblich geringere Stabilisierungsenergien, jedoch ist dies im Einklang mit den schon vorgestellten Komplexbildungsenergien der Wechselwirkung mit nur einem Alkoholmolekül (Tabellen<sup>1</sup> C1-C9). Die Stärke der Wasserstoffbrücke wird auch hier um ungefähr 0,3 kcal/mol verringert. Hier stellt das N-Benzoyl-threoninmethylester-Aggregat ebenfalls eine Ausnahme dar. Wegen des relativ großen Y-Substituenten und der zusätzlich vorhandenen Alkoholfunktion wird für die Dockingstelle I nur ein Energiegewinn von -3.14 kcal/mol berechnet und der Angriff des zweiten Fließmittelmoleküls an der Seite A führt zu einer weiteren Stabilisierung von -2.6 kcal/mol.

Mit dem Propylamin anstelle eines zweiten Alkohols bleibt die stabilste Wechselwirkung der oben diskutierten Komplexe erhalten. Gegen die Wasserstoffbrückenbindung zum Isopropylalkohol kann die um 0.7-1.2 kcal/mol schwächere Bindung zum Propylamin nicht konkurrieren. Durch die Ausbildung der Alkoholwasserstoffbrücken an der Seite I wird aber auch der

---

<sup>1</sup> Zur Benennung der einzelnen Aggregate in den Tabellen siehe Seite 305

Angriff des Propylamins auf die andere Seite erschwert. Es ergibt sich eine eindeutige Präferenz der zweizähligen Wechselwirkung der Propylaminwasserstoffatome mit dem Sauerstoffatom der Alkoholkomponente des Esters und dem Amidcarbonylsauerstoffatom. Da sich die Aminosäureester den relativ starken Wasserstoffbrücken des Alkohols anpassen, kann die Wechselwirkung mit dem Propylamin bis zu 0.40 kcal/mol schwächer werden. Eine Sonderstellung nimmt auch hier das entsprechende N-Benzoyl-threoninmethylester-Aggregat ein. Auf Grund der stärkeren Wasserstoffbrücke, greift das Propylamin an der Seite I an und begünstigt die Komplexbildung mit -3.85 kcal/mol. Die Alkoholwechselwirkung vermag den Energiegewinn lediglich um -3.02 kcal/mol zu erhöhen. Bei den anderen Aminosäureestern trägt der Alkohol mit ungefähr -4.5 kcal/mol zur Stabilisierung des Komplexes bei, während die Wechselwirkung des Propylamins um 1 bis 1.5 kcal/mol reduziert wird. Die graphischen Darstellungen der berechneten Minimumsgeometrien sind in den Abbildungen C28-C36 ersichtlich. Die Resultate der diskutierten Rechnungen findet man in den Tabellen<sup>1</sup> C28-C36.

Zusammenfassend kann gesagt werden (unter Ausschluß des Sonderfalls der N-Benzoyl-threoninmethylester-Komplexe):

Beide Modellsubstanzen bevorzugen den Angriff auf die Seite I, die auch zur Dimerenbildung benötigt wird.

In dieser Angriffsposition werden für das Isopropanol die stärkeren Wasserstoffbrückenbindungen berechnet.

Konkurrieren beide Modellsubstanzen um die Angriffsseite A, weil I durch ein schon vorhandenes Isopropanolmolekül blockiert ist, so ergibt sich eine eindeutige Bevorzugung des Propylamins. Durch die Ausbildung von zwei Wasserstoffbrückenbindungen mit dem Propylamin fällt die Stabilisierungsenergie der Aggregate betragsmäßig um ca. 1 kcal/mol höher aus als bei den Bis-Isopropylalkohol-Komplexen.

Als nächstes werden nun die Wechselwirkungen der N-Acyl-Aminosäureester-Dimere zum Isopropanol und zum Propylamin untersucht. (Auf Grund seiner Sonderstellung ist der N-Benzoyl-threoninmethylester von der folgenden Diskussion ausgeschlossen.)

Durch die Ausbildung von Wasserstoffbrücken zu den Modellsubstanzen werden die Dimere bis auf wenige Ausnahmen um ca. 0.2-0.3 kcal/mol leicht destabilisiert. Analog zur Diskussion der Aminosäureester-Isopropanol-Propylamin-Aggregate ist hier eine Wechselwirkungsstelle durch die Dimerisierung blockiert. Deshalb zeigen die sich ergebenden Dimergeometrien große Ähnlichkeiten zu denen der bereits besprochenen Monomerkomplexe. Für die meisten Assoziate ist die Wechselwirkung zum Propylamin energetisch günstiger (Aggregatbildungsenergie -2.30 bis -2.87 kcal/mol). Lediglich im Falle großer Y-Substituenten (N-Benzoyl-valinmethylester, N-Benzoyl-phenylalaninmethylester) wird die Wasserstoffbrücke zum Isopropanol energetisch gleich berechnet. Der chelatartige Angriff des Propylamins (Angriffspositionen

---

<sup>1</sup> Zur Benennung der einzelnen Aggregate in den Tabellen siehe Seite 305

A3,A6 oder A2,A7) wird in den meisten Geometrieoptimierungen trotz Vorgabe anderer Ausgangsgeometrien als Minimum gefunden. Aus diesem Grund sind auch nur sie in den Tabellen<sup>1</sup> C37-C45 berücksichtigt worden. Die Ausrichtung des Propylrestes des Amins parallel zum Y-Substituenten wird eindeutig bevorzugt, wie man auch den Abbildungen der Minimumsgeometrien (Abb. C37-C45) entnehmen kann.

In den Isopropanol-Dimer-Assoziaten variiert der Anteil des Isopropanols an der Komplexstabilisierungsenergie um ca. 1-2.8 kcal/mol. Die entsprechenden Daten sind in den Tabellen<sup>1</sup> C46-C54 aufgeführt. Die Minimumsgeometrien der Komplexe werden in den Abbildungen C46-C54 gezeigt.

Der Unterschied zwischen den homochiralen und den heterochiralen Komplexen läßt sich nicht so einfach systematisieren. Mit Ausnahme des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesters weisen sowohl die Komplexe des Propylamins als auch die des Isopropanols mit den homochiralen Dimeren eine höhere oder zumindest gleichwertige Stabilität gegenüber den heterochiralen Aggregaten auf. Die schon diskutierten Differenzen zwischen den Isopropanol- und den Propylamin-Wechselwirkungen sind aber im Falle der heterochiralen Komplexe unwesentlich stärker.

Die Vergrößerung der Dimer-Propylamin-Komplexe um ein weiteres Alkoholmolekül führt zu keinen bemerkenswerten Änderungen. Unter bisweilen weiterer Destabilisierung der Dimer-substrukturen bleibt es bei den für die entsprechenden Trimeren schon dargestellten Wechselwirkungsenergien und Geometrien. Die Tabellen<sup>1</sup> C55-C63 und die Abbildungen C55-C63 enthalten die berechneten Ergebnisse und Minimumsgeometrien.

Die Dimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregate zeichnen sich durch eine symmetrische Geometrie aus. Im Gegensatz zu den entsprechenden Propylamin-Komplexen ist die Dimersubstruktur leicht stabiler. Die schon bei den Dimer-Isopropanol-Aggregaten besprochenen Wechselwirkungsmuster bleiben erhalten, so daß sich analoge Geometrien und Wechselwirkungsenergien ergeben. Die berechneten Daten und Minimumsgeometrien sind den Tabellen<sup>1</sup> C64-C72, bzw. Abbildungen C64-C72 aufgeführt.

Zusammenfassend ergibt sich:

Die Wechselwirkungen zwischen den Dimeren und den Modellsubstanzen sind durch kooperative Effekte der Wasserstoffbrücken geprägt. Verglichen mit den entsprechenden Monomerkomplexen sind die Aggregatsbildungsenergien bei den Dimeren leicht positiver. Die Stabilität der Dimersubstrukturen selber wird durch die weitere Ausbildung von Wasserstoffbrücken leicht geschwächt. Eine eindeutige Bevorzugung der heterochiralen Komplexe bei der Wechselwirkung zum Modell der stationären Phase, bzw. der homochiralen Komplexe zum Modell für die mobile Phase kann nicht festgestellt werden.

Bei der hier gegebenen Diskussion beziehen sich die Wechselwirkungsenergien  $W_M$  immer auf die berechneten globalen Minimumsenergien der Komplexbestandteile. In den Tabellen<sup>1</sup> C1-

---

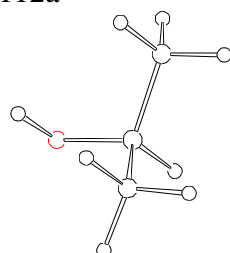
<sup>1</sup> Zur Benennung der einzelnen Aggregate in den Tabellen siehe Seite 305

C72 sind ebenso die Wechselwirkungsenergien  $W_A$ , die sich auf die im Aggregat vorgefundenen Geometrien beziehen, aufgeführt. So manche, auf den ersten Blick bedeutend zu klein erscheinende Wechselwirkungsenergie  $W_M$  erklärt sich mit ihrer Hilfe von selbst. Die Wechselwirkungsenergien  $W_A$  berücksichtigen in keiner Weise die sterischen Anforderungen, die den einzelnen Molekülen im Komplex zur Ausbildung einer optimalen Wasserstoffbrückenbindung auferlegt werden. In den entsprechenden Dimerkomplexen weist z.B. der N-Benzoyl-threoninmethylester, bezogen auf die globalen Minimumsenergien, repulsive Wechselwirkungen zu dem Propylamin auf, mit dem er aber eine Wasserstoffbrückenbindung unterhält. Diese abstoßende Wechselwirkung resultiert jedoch lediglich aus der energetisch höherliegenden Konformation des N-Benzoyl-threoninmethylester, die zur Dimerbildung benötigt wird. Zieht man die Wechselwirkungsenergien  $W_A$  zur Diskussion der Ergebnisse der AM1-Rechnungen heran, ergeben sich bedeutend höhere Wechselwirkungsenergien. Die dargestellten Unterschiede zwischen den einzelnen Assoziaten treten sehr viel deutlicher hervor, jedoch sind aus den Aggregatsbildungsenergien  $W_A$  die gleichen qualitativen Resultate wie aus den Wechselwirkungsenergien  $W_M$  zu gewinnen.

Die genaue Durchsicht der Tabellen<sup>1</sup> C1-C72 zeigt, daß, bis auf wenige Ausnahmen, der Energieunterschied  $\Delta W_M$  zwischen den Propylamin-Komplexen und den entsprechenden Isopropanol-Aggregaten hauptsächlich auf die energetisch ungünstige Konformation des Isopropanols zurückzuführen ist. In den entsprechenden Komplexen nimmt der Alkohol die in Abbildung 112b dargestellte Konformation ein. Sie unterscheidet sich von der berechneten globalen Minimumsstruktur (siehe Abbildung 112a) durch die Stellung der Methylgruppen bezüglich der OH-Gruppe. Erst in der energetisch höherliegenden Konformation ist es dem Isopropylalkohol möglich, eine Donor- sowie eine Akzeptorwasserstoffbrücke auszubilden.

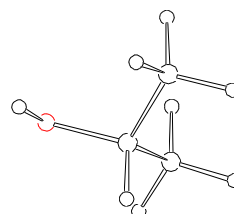
Abbildung 112 Konformationen des Isopropanols

Abb.: 112a



globale Minimumsgeometrie  
(-69.54 kcal/mol)

Abb.: 112b

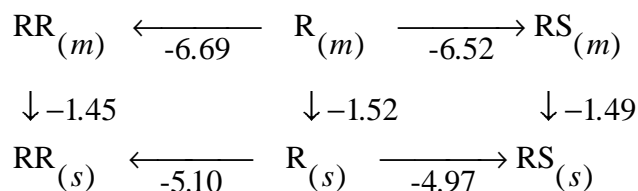


Durch Rotation der OH-Gruppe  
entstandene lokale Minimumsgeometrie  
(-68.02 kcal/mol)

<sup>1</sup> Zur Benennung der einzelnen Aggregate in den Tabellen siehe Seite 305

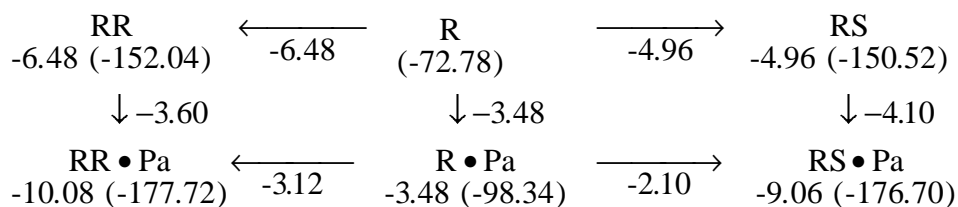
Abbildung 113 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoylalaninbenzylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

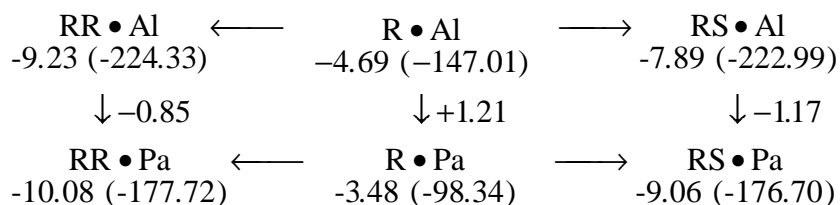


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

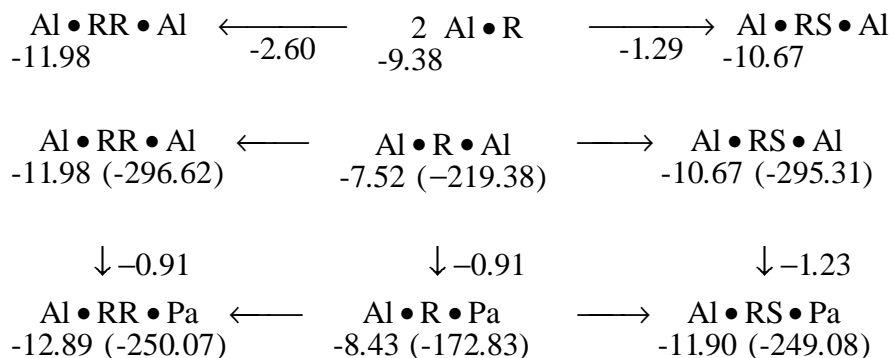
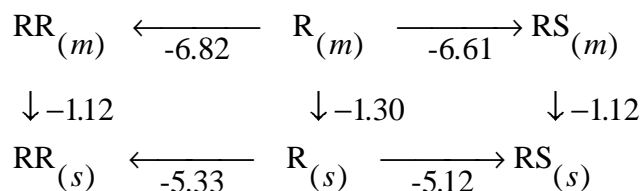


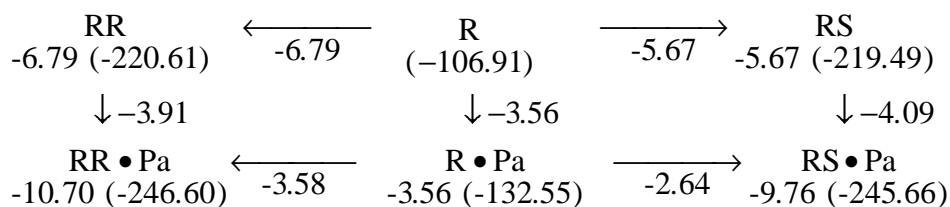
Abbildung 114 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoylalaninethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

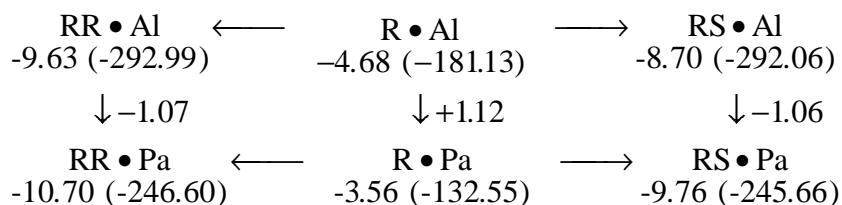


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

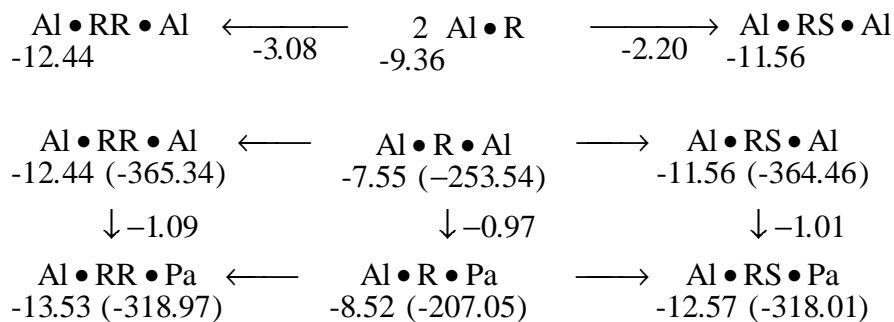
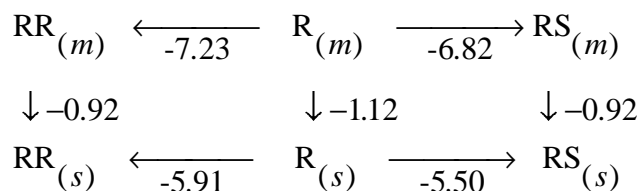


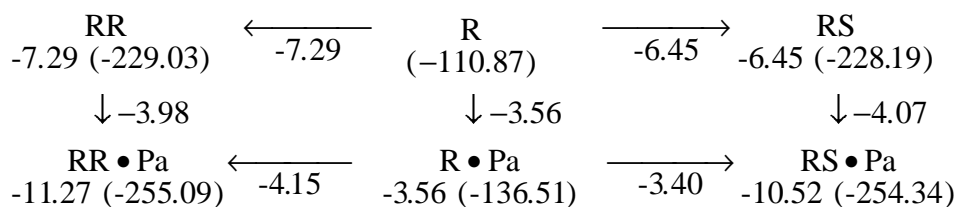
Abbildung 115 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoylalaninisopropylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

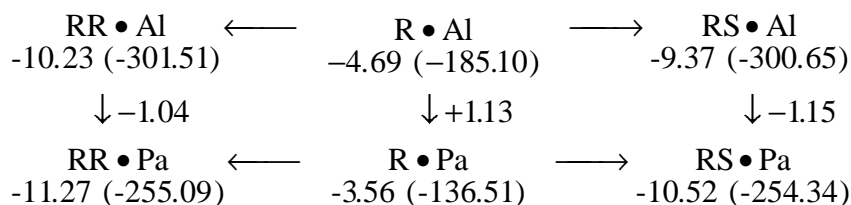


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

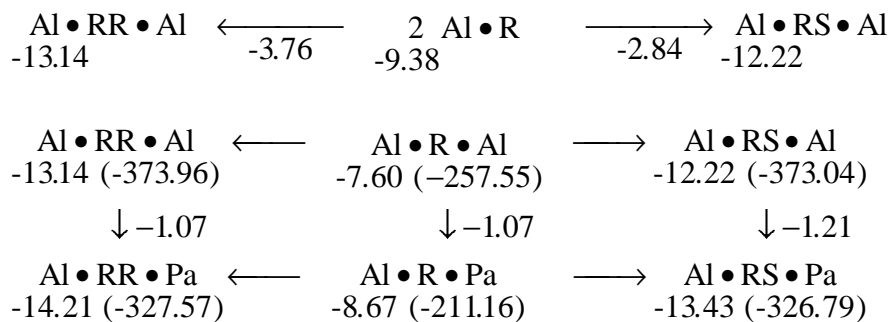
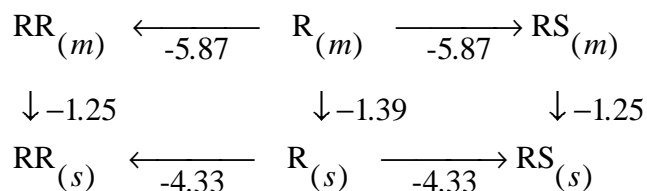




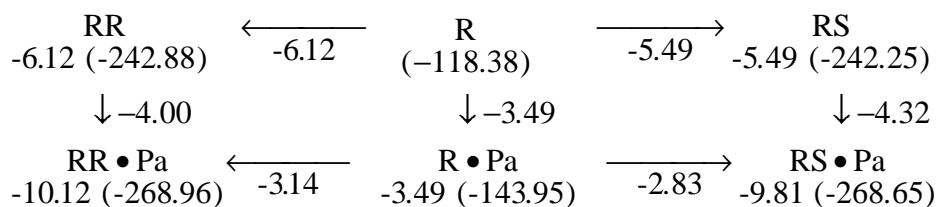
Abbildung 116 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoyl-leucinmethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

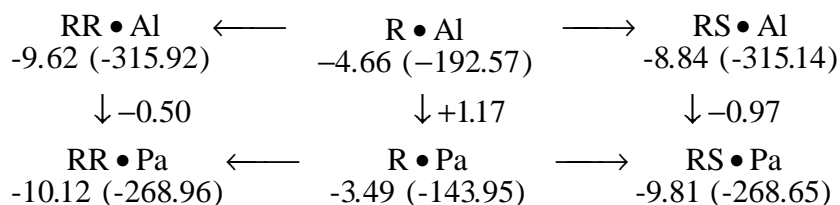


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

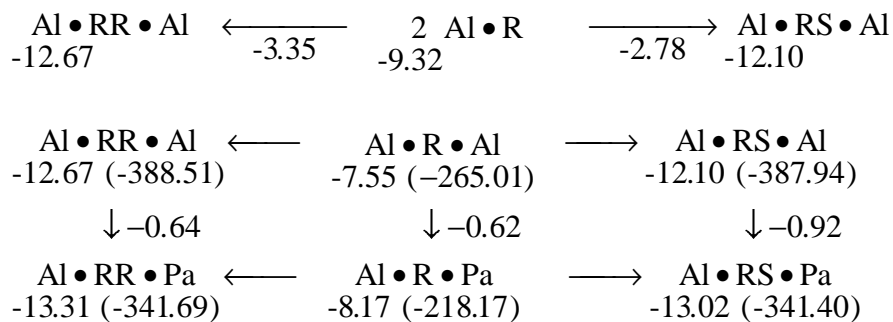
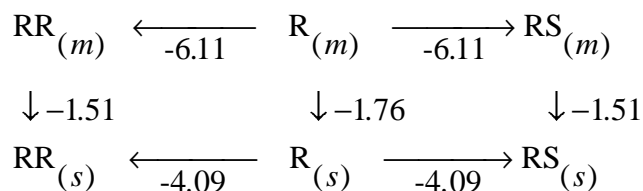


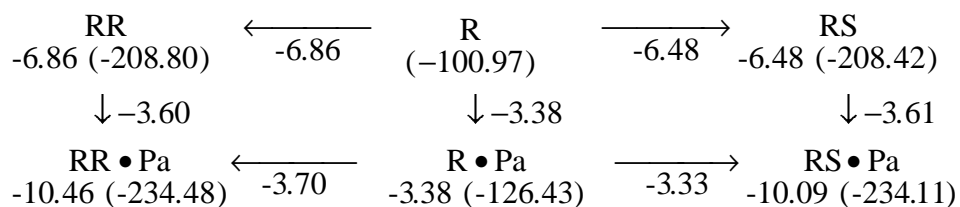
Abbildung 117 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoylalaninmethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

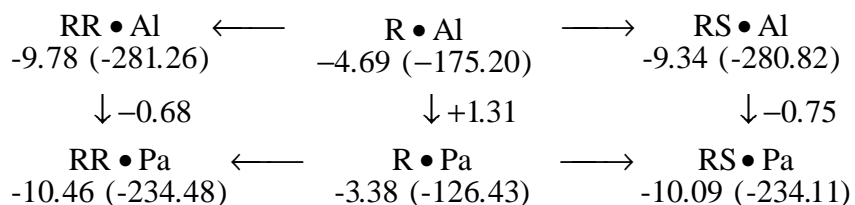


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

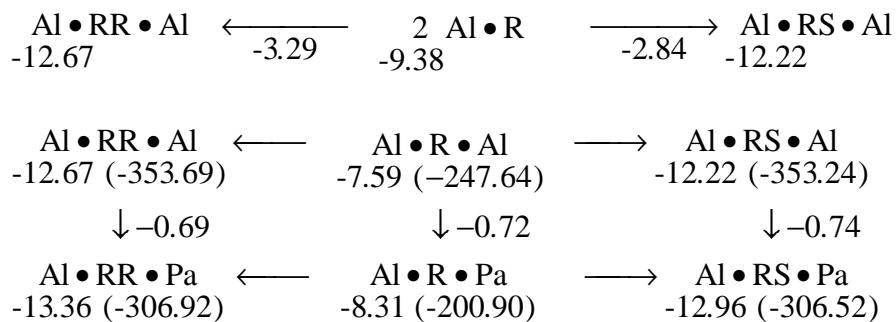
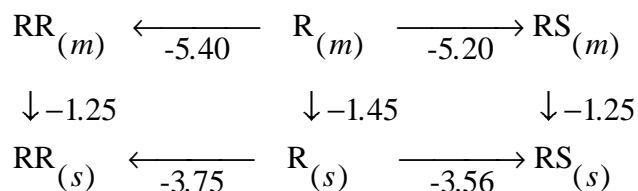


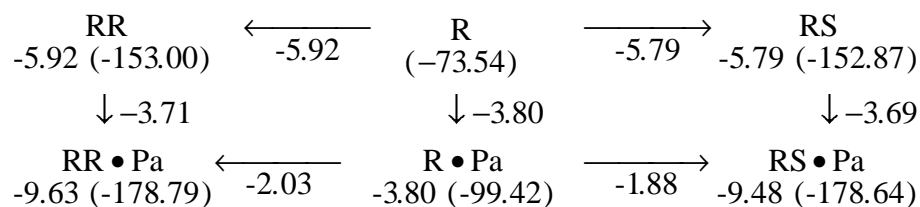
Abbildung 118 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

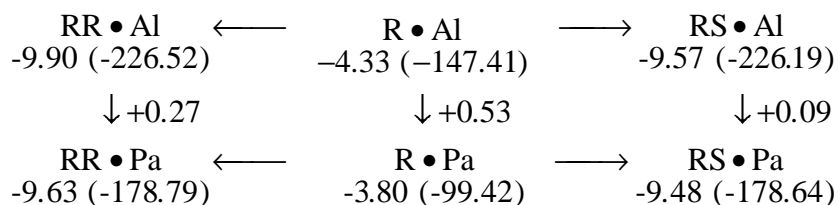


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

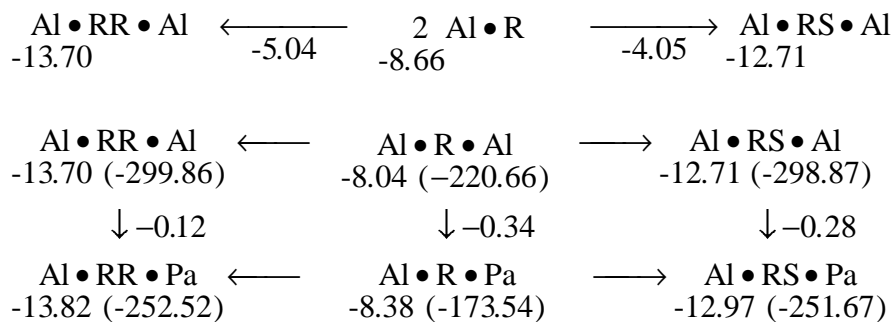
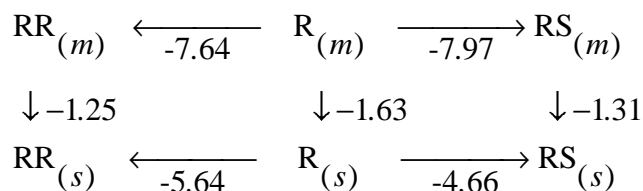


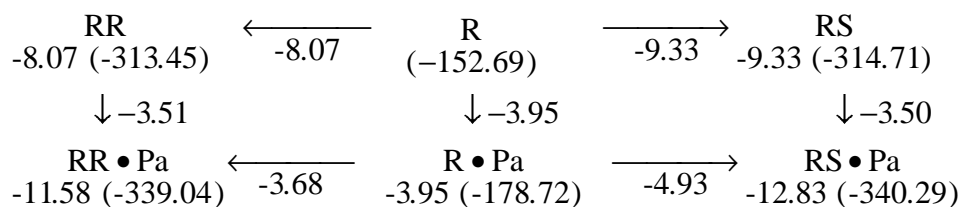
Abbildung 119 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoyl-threoninmethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

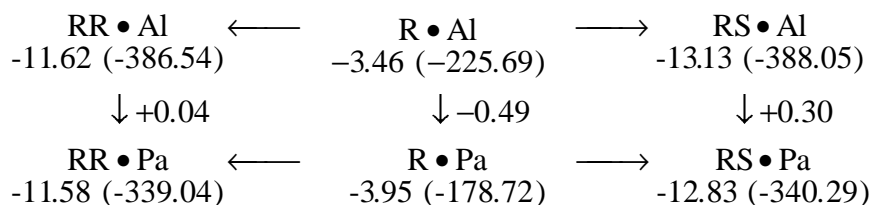


AM1-Rechnungen :

1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :

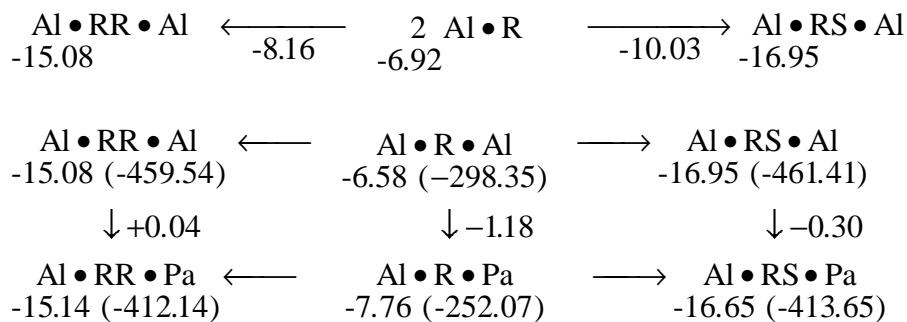
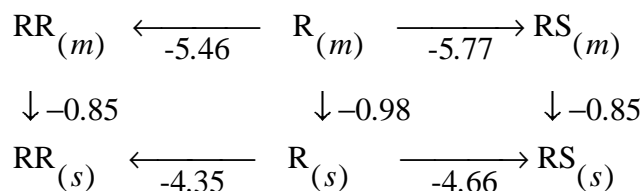


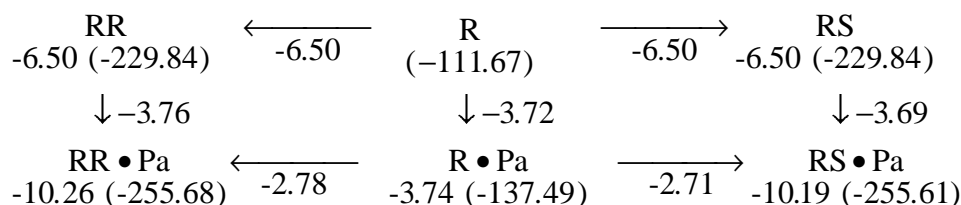
Abbildung 120 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-Benzoyl-valinmethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

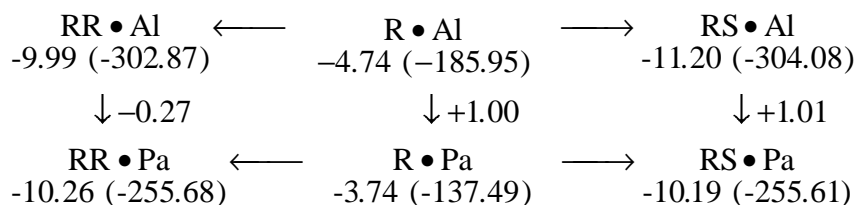


AM1-Rechnungen :

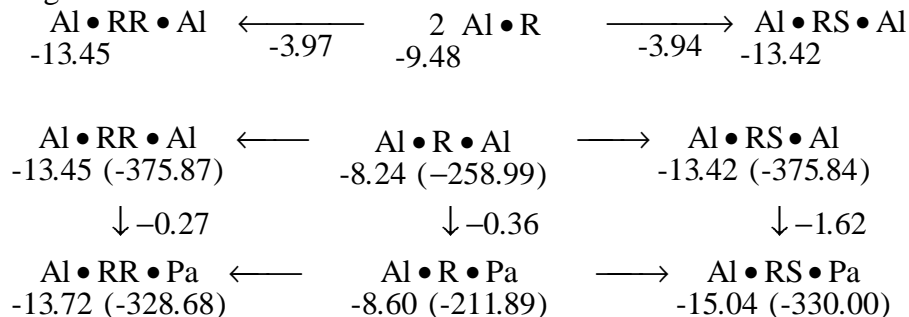
1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



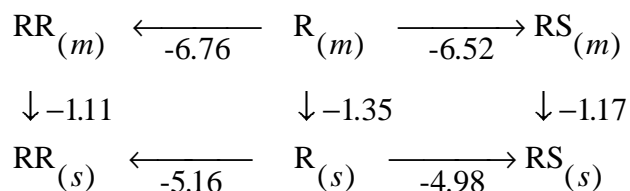
3.Approximationsgrad :



Die zwischen dem 2. und 3.Approximationsgrad hier auftretenden Unterschiede für den Phasenübergang des heterochiralen Dimers beruhen auf der Konformationsänderung des Isopropanols.

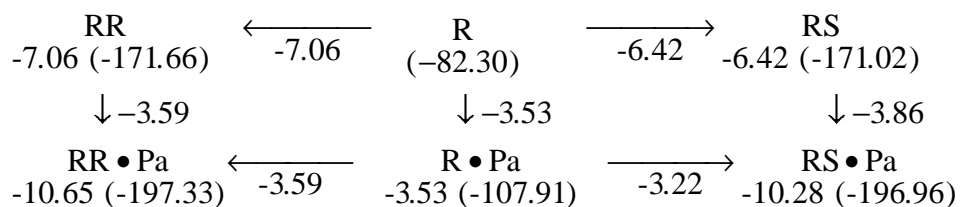
Abbildung 121 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des N-2-Naphthoyl-alaninmethylesters (siehe Erläuterung zu Abbildung 70 Seite 101)

Chromatogrammsimulation :

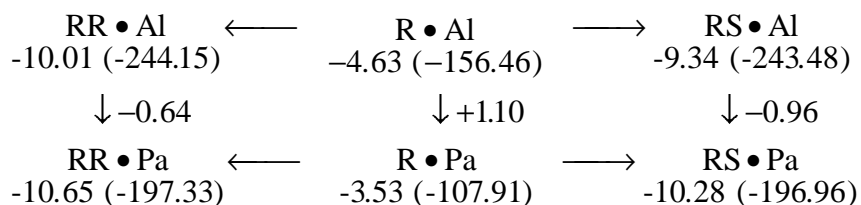


AM1-Rechnungen :

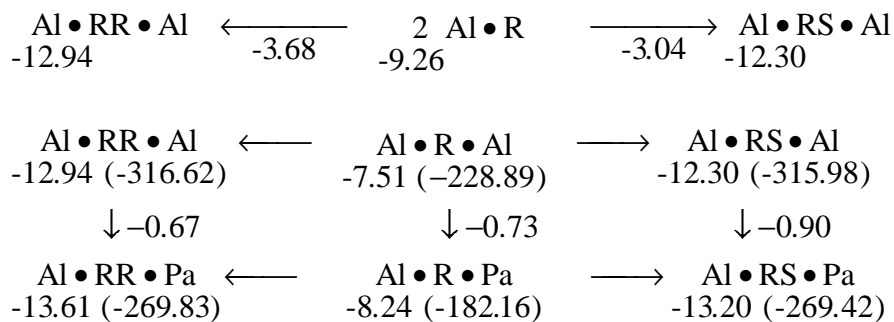
1.Approximationsgrad :



2.Approximationsgrad :



3.Approximationsgrad :



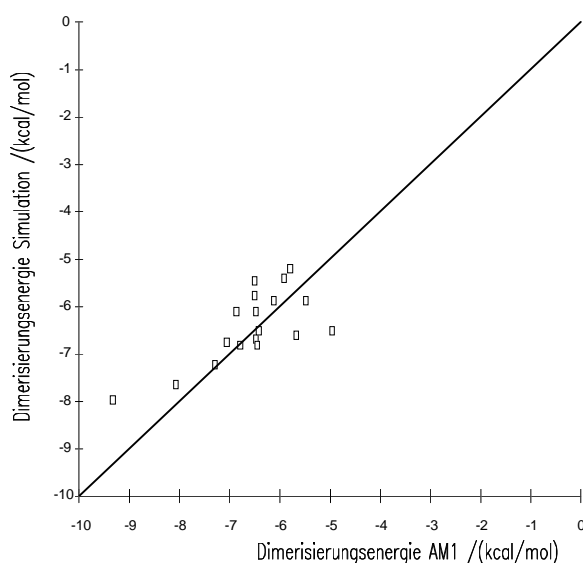
#### 4.3.3. Vergleich der Chromatogrammsimulationen mit den AM1-Rechnungen.

Auf Grund des nun vorliegenden umfangreichen Datenmaterials (siehe Abbildung 113-121) kann nun abgeschätzt werden, welche AM1-Rechnungen zur Beschreibung der Enantiomeren-überschußabtrennung notwendig sind.

Der Vergleich der Chromatogrammsimulationen der verschiedenen Aminosäureester mit den entsprechenden AM1-Rechnungen (siehe Abbildung 113-121) zeigt :

1. Die Dimerisierung in der mobilen Phase wird am besten erfaßt ohne Berücksichtigung des Fließmittels. Größenordnungen und Tendenzen der Energien aus den Chromatogrammsimulationen werden durch die AM1-Rechnungen richtig beschrieben. Zur Veranschaulichung der guten Qualität sind die aus den Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen resultierenden Dimerisierungsenergien als Korrelationsdiagramm (Abbildung 122) aufgetragen.

Abbildung 122 : Korrelationsdiagramm für die aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Dimerisierungsenergien der N-Acyl-Aminosäureester



Das AM1-Verfahren überbetont meistens den energetischen Unterschied zwischen den homochiralen und heterochiralen Dimeren. Bis auf die Rechnungen zu den N-Benzoyl-threoninmethylestern werden die relativen Stabilitäten der diastereomeren Assoziate zueinander richtig wiedergegeben. Ein klarer Trend, daß allgemein die Dimerisierungsenergien zu hoch oder zu niedrig berechnet werden, läßt sich jedoch den Ergebnissen nicht entnehmen.

Ein Einfluß des Fließmittels auf die Dimerisierung, der in den Approximationsgraden 2 und 3 beschrieben wird, kann mit den AM1-Rechnungen nicht bestätigt werden. Auch wenn man den Dimerisierungsgleichgewichten unterschiedlichste Reaktionen zu Grunde legt, ist lediglich eine Erniedrigung der Aggregatsbildungsenergie zu beobachten. In diesen Näherungsniveaus

berechnet das AM1-Verfahren sogar bisweilen ein endothermes Reaktionsverhalten für die Reaktion der Monomeraggregate zu den entsprechenden Dimerkomplexen. (Deshalb sind auch diese Werte in den Abbildungen 113 -121 nicht mehr aufgeführt.)

Wie schon für das AM1-Verfahren diskutiert wurde, lassen sich auch für die aus den Chromatogrammsimulationen berechneten Dimerisierungsenergien keine Korrelationen mit der Größe der Substituenten X, Y oder Z herleiten.

2. Die AM1-Ergebnisse zur Beschreibung der Reaktionen in der stationären Phase sind schwierig zu interpretieren, da nicht bekannt ist, nach welchem Mechanismus die Dimerisierung ablaufen könnte. Die Resultate der AM1-Rechnungen liefern zu dieser Problematik auch keinen Lösungsvorschlag. Es ist allgemein festzustellen, daß auch hier ohne Berücksichtigung des Fließmittels die Größenordnungen der berechneten Bildungsenthalpiendifferenzen durchaus mit denen aus den Chromatogrammsimulationen übereinstimmen. Bei allen Aminosäureestern ermitteln aber die AM1-Rechnungen gegenüber den Simulationen zu niedrige Dimerisierungsenergien in der stationären Phase.

3. Phasenübergänge werden im 1.Approximationsgrad nicht korrekt erfaßt. Erst die Ergebnisse des 2. und 3.Approximationsgrades sind den Resultaten aus den Chromatogrammsimulationen äquivalent. Die Kapazitätsfaktoren der Monomere können jedoch erst mit dem 3.Näherungsgrad richtig beschrieben werden. Die im vorherigen Abschnitt diskutierte Abhängigkeit der Bildungsenthalpien von den Geometrien der Monomeraggregate legten dies auch schon nahe. Es zeigte sich dort, daß die Aggregatsbildung mit dem Propylamin verglichen zum Isopropanol nur dann günstiger ist, wenn die zur Wechselwirkung mit einem zweiten Aminosäureester befähigte Dockingstelle blockiert ist. Für die Wiedergabe der Phasenübergänge der Dimeren reichen deshalb Rechnungen im Rahmen des 2.Approximationsgrades vollkommen aus. Die geringfügigen Änderungen der Resultate durch Erhöhung des Näherungsniveaus bestätigen diese Annahme. Desweiteren ist zu bedenken, daß die hier diskutierten Enantiomerenüberschußabtrennungen der verschiedenen Aminosäureester, wie schon die des Binaphtols, nicht mit reinem Isopropanol als Fließmittel durchgeführt wurden, sondern mit unterschiedlichen Hexan/Isopropanol-Gemischen. Die für einen Phasenübergang berechneten AM1-Resultate können deshalb im Vergleich mit der Simulation nur als Richtwerte aufgefaßt werden. Ein etwaiger Einfluß der für die einzelnen Simulationen verwendeten Bodenzahlen schlägt sich in den semiempirischen Rechnungen nicht nieder.

Zusammenfassend muß man feststellen, daß die im Kapitel 3.1 vorgenommene generelle Unterteilung der Vorgehensweise bei den Rechnungen in verschiedene Approximationsgrade keine sinnvolle Korrelation mit den Simulationen aufweist und der notwendige Rechenaufwand problemspezifisch abgewogen werden muß. (Im weiteren soll diese generelle Vorgehensweise aber lediglich als Gliederungsschema beibehalten werden.)



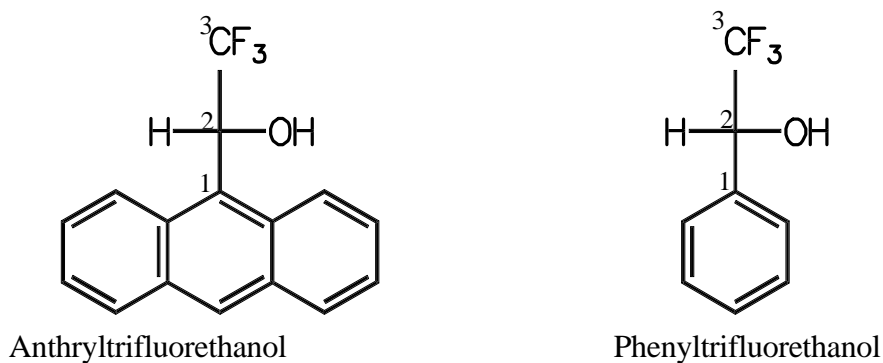
Während die Beschreibung der Assoziation in der mobilen Phase schon fast quantitativen Charakter annimmt, sind aber die Ergebnisse zur Berechnung der Phasenübergänge nur qualitativ richtig, die Größenordnungen stimmen grob überein.

Bedenkt man, daß man sich mit der Interpretation der Bildungsenthalpien auf eine  $\frac{1}{100}$  kcal/mol schon am Rande der Seriösität bewegt und somit die Grenzen des AM1-Verfahrens erreicht, so kann man auch gar nicht erwarten, daß die aus den Kapazitätsfaktoren folgenden extrem kleinen Energieunterschiede von dem AM1-Verfahren korrekt aufgelöst werden können. Diese Vorgehensweise ist nur unter der Annahme gerechtfertigt, daß man ziemlich ähnliche Aggregate berechnet und diese alle den gleichen AM1-spezifischen Fehlern unterliegen. Desweiteren werden zum Vergleich mit den Simulationen nicht die berechneten Bildungsenthalpien direkt herangezogen, sondern nur ihre Differenzen und damit ist eine günstige Fehlerkompensation möglich. Die gute Qualität der Wiedergabe der Dimerisierungsenergien zeigt, daß diese Annahmen gerechtfertigt sind.

Abschließend kann nur wiederholt betont werden, daß für ein semiempirisches Verfahren die hier vorliegenden Ergebnisse eine sehr gute Übereinstimmung mit den Chromatogrammsimulationen liefern und eine höhere Genauigkeit auch nicht zu erwarten ist. Die berechneten Assoziatsgeometrien sind daher als ein vertrauenswürdiges Modell für die Enantiomerenüberschußabtrennung der N-Acyl-Aminosäureester anzusehen.

#### 4.4.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung des Anthryltrifluorethanol und des Phenyltrifluorethanol

Abbildung 123 :



Von den Enantiomerenüberschußabtrennungen der Arylcarbinole Anthryltrifluorethanol [4, 5] und Phenyltrifluorethanol [4] (siehe Abbildung 123) wurde schon in den Promotionsarbeiten von Heinzerling und Coors berichtet. Die aus diesen Separationen ermittelten experimentellen Daten [4] und die berechneten Werte aus den Chromatogrammsimulationen sind in den Tabellen 57 und 58 gegenübergestellt. Die Anpassung der Chromatogramme erfolgte nach der im Kapitel 4.1.1 geschilderten Vorgehensweise. Die Überlagerungen der experimentellen und berechneten Chromatogramme in den Graphiken A88-A99 unterstreichen die zufriedenstellende Qualität der jeweils unter den Tabellen 57 bzw. 58 angegebenen Parameter. Auch die Auftragung der Retentionszeitmaxima gegen die optische Reinheit der Probenaufgabe in den Abbildung 124 bzw. 125 weist auf die korrekte Parameterwahl hin.

Im Falle des Phenylderivats wurde im analytischen Maßstab von Heinzerling keine sichtbare Auftrennung beobachtet. Lediglich bei einer Aufgabe von 40 mg der optischen Reinheit 70 %ee auf eine präparative Säule ermittelte er einen  $\alpha$ -Wert von 1.04. Heinzerling schätzte hieraus ab, daß dies einer Probenaufgabe von 1.4 mg auf die ansonsten verwendete analytische Säule entspricht. In den Simulationen wurden ab einer Aufgabe von 200  $\mu$ g in der Summenkurve separat auftretende Enantiomerenüberschuß- und Racematpeaks berechnet. Eine schwache Schulter im experimentellen Chromatogramm der Aufgabe 100  $\mu$ g der optischen Reinheit 70 %ee (Abbildung A94) wird in der Simulation ebenfalls gut reproduziert.

Besonders hervorzuheben sind die ermittelten Parameter für die Trennung des Phenyltrifluorethanol. Die heterochiralen Dimere sind hier im völligen Gegensatz zu denen des Anthryltrifluorethanol stabiler als die homochiralen Assoziate.

Tabelle 57 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des Anthryltrifluorethanol

Aufgabe- menge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*30	100	23.46		7.44		2.78		23.46		7.44		2.78	
*30	0		23.86	7.58		2.78			23.99	7.63		2.78	
30	68	23.15 23.78	23.70 24.46	7.33 7.55	7.53 7.80	2.78 2.78	1.03 1.03	23.62	24.7	7.50	7.88	2.78	1.05
30	86	23.02	24.30	7.28	7.74	2.78	1.06	23.53	25.1	7.46	8.03	2.78	1.08
100	100	20.78		6.99		2.60		22.19		6.98		2.78	
100	0		21.21	7.16		2.60			22.68	7.16		2.78	

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:       $k_{(RR)}$  :      6.2600                       $k_{(RS)}$  :      6.2600  
                           $k_{(R)}$  :      8.5324  
                           $Km_{(RR)}$  :      5.5 10<sup>3</sup> l/mol                       $Km_{(RS)}$  :      2.5 10<sup>3</sup> l/mol  
                   $\beta$ :      1                      Bodenzahl: 4000

Tabelle 58 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten des Phenyltrifluorethanol

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
20	100	25.41		8.08		2.8		25.49		8.10		2.8	
20	0		26.78	8.56		2.8			25.89	8.24		2.8	
20	40	26.14		8.34		2.8		25.84		8.23		2.8	
20	60	25.68		8.17		2.8		25.71		8.18		2.8	
20	80	26.30		8.39		2.8		25.59		8.13		2.8	
20	90	25.57		8.15		2.8		25.53		8.12		2.8	
*100	100	23.60		7.43		2.8		23.46		7.388		2.8	
*100	0		24.4	7.71		2.8			24.15	7.63		2.8	
100	70	23.48	24.00	7.39	7.57	2.8	1.02	23.66	24.7	7.45	7.82	2.8	1.05

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	6.41	$k_{(RS)}$ :	7.21
$k_{(R)}$ :	9.0		
$Km_{(RR)}$ :	3.2 10 <sup>3</sup> l/mol	$Km_{(RS)}$ :	5.5 10 <sup>3</sup> l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	2000

Abbildung 124 : Auftragung der experimentellen [4] und simulierten Retentionszeiten des Anthryltrifluorethanols gegen die optische Reinheit (Aufgabemenge 30  $\mu\text{g}$ )

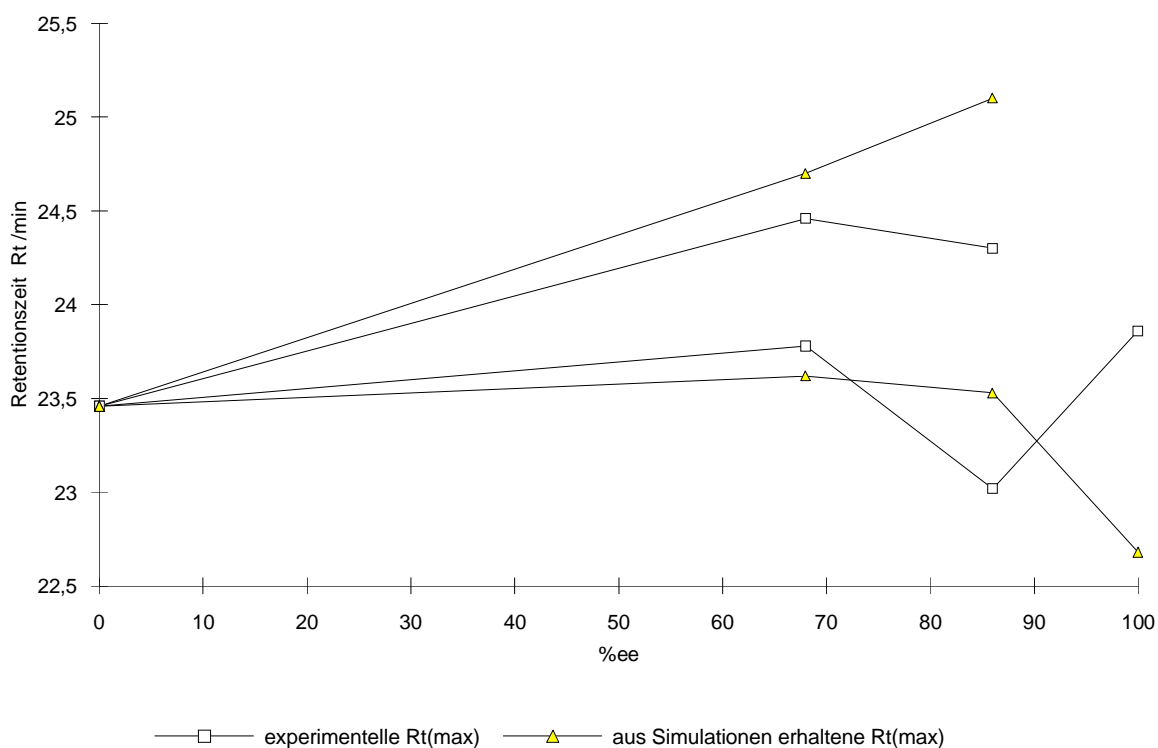
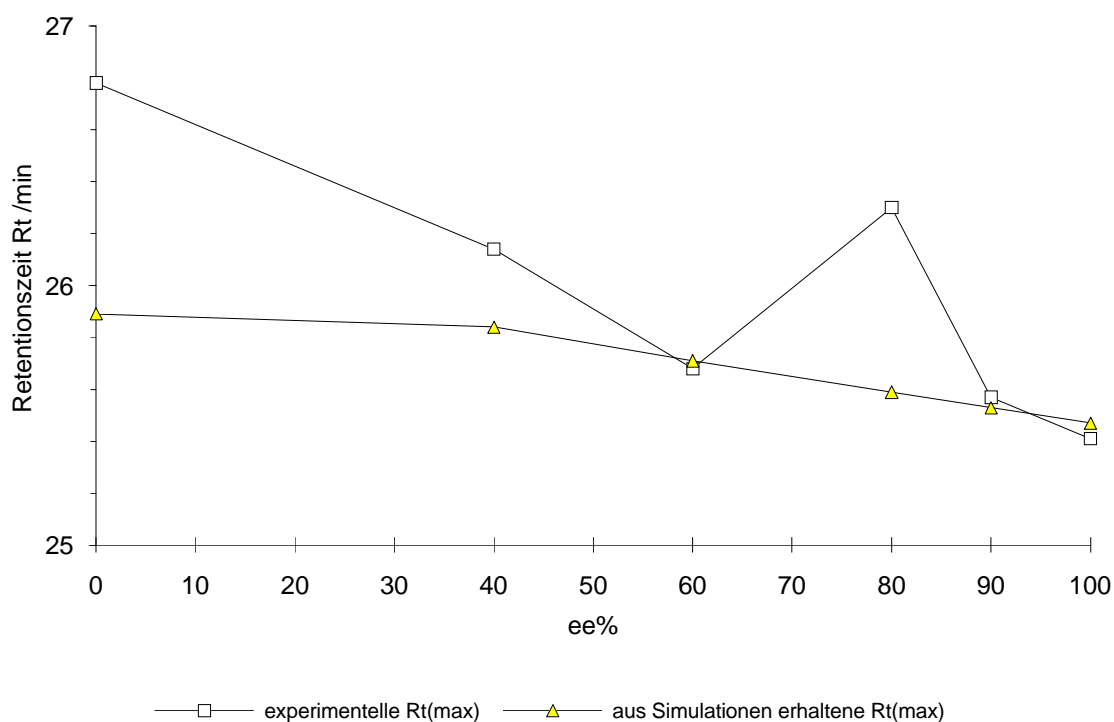
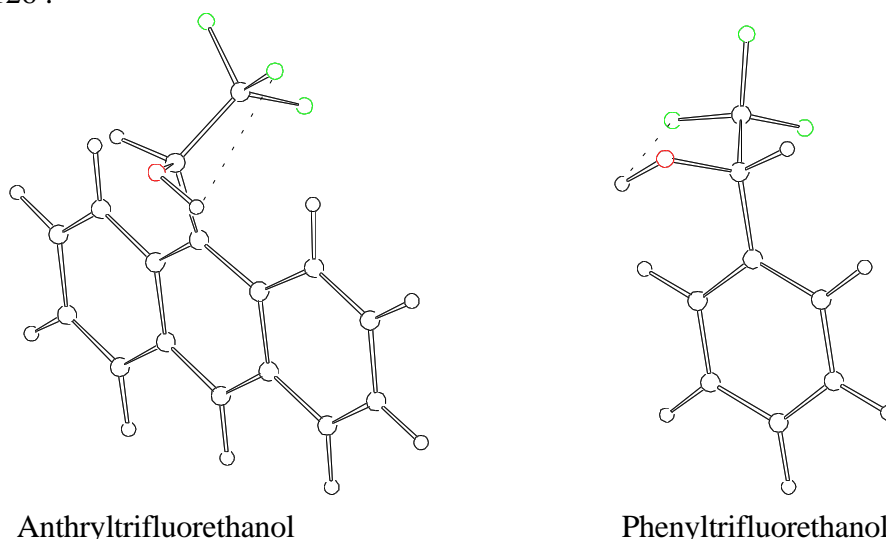


Abbildung 125 : Auftragung der experimentellen [4] und simulierten Retentionszeiten des Phenyltrifluorethanols gegen die optische Reinheit (Aufgabemenge 20  $\mu\text{g}$ )



#### 4.4.2. Berechnung der Arylcarbinol-Assoziat

Abbildung 126 :



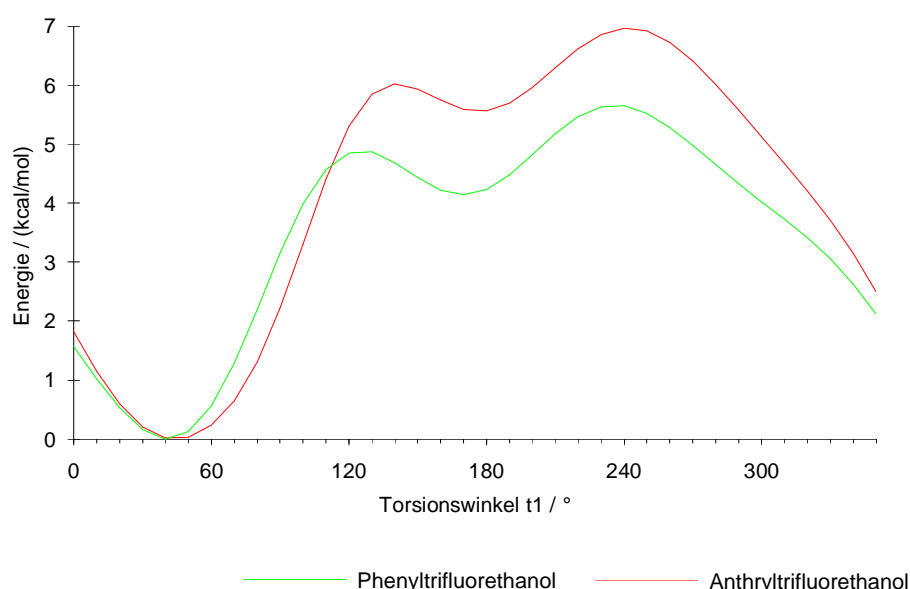
Das Anthryltrifluorethanolmolekül ist durch seine relativ starre Geometrie gekennzeichnet. Die freie Rotation des Anthrylsubstituenten ist entsprechend den AM1-Rechnungen nicht möglich. Gemäß der Abbildung 123 wird durch das mit dem asymmetrischen C-Atom (2) verbundene C-Atom (1) das aromatische Ringsystem sehr stark aus seiner Planarität verzerrt. Diese Störung des Anthrylrings wird durch den voluminösen Trifluormethylsubstituenten am C-Atom (1) verursacht. Es wird eine Geometrie bevorzugt, in der die OH-Gruppe und das Wasserstoffatom, die an das asymmetrische C-Atom gebunden sind, auf der einen Seite des aromatischen Ringsystems stehen, während die Trifluormethylgruppe die andere Seite besetzt. Durch eine Wasserstoffbrücke zwischen der OH-Gruppe und einem der Fluoratome ist die Minimumsgeometrie des Anthryltrifluorethanol sehr stark fixiert [61]. Das Phenylderivat weist weniger starke sterische Spannungen auf. Es bevorzugt zwar eine dem Anthryltrifluorethanol analoge Geometrie, orientiert jedoch seine Trifluormethylgruppe grundsätzlich anders. Während im Anthryltrifluorethanol nur eines der Fluoratome auf das aromatische Ringsystem zeigt, stehen beim Phenyltrifluorethanol zwei Fluoratome über der Phenylgruppe. Zur Erleichterung des Verständnisses sind hier, neben den in Abbildung 126 dargestellten, aus AM1-Rechnungen erhaltenen Minimumsstrukturen, einige Torsionswinkel in Tabelle 59 angegeben. Die Definitionen der Torsionswinkel beruhen auf der in der Graphik 123 benutzten Numerierung der C-Atome und sind ebenfalls der Tabelle 59 zu entnehmen.

Tabelle 59 : Vergleich und Definitionen der Torsionswinkel t1, t2 und t3 im Anthryltrifluorethanol und Phenyltrifluorethanol

Torsionswinkel Definition	Anthryltrifluorethanol	Phenyltrifluorethanol
t1: C(1)-C(2)-O-H	50°	50.9°
t2: C(1)-C(2)-C(3)-F	6.7°	-166°
t3: F-C(3)...O-H	60°	21°

Von besonderem Interesse, auch in Bezug auf die noch zu besprechende Dimerisierung, ist die Stabilität der intramolekularen Wasserstoffbrücke und der energetische Einfluß der Rotation der OH-Gruppe. In Abbildung 127 ist deshalb der energetische Verlauf für die Änderung des Torsionswinkels  $t_1$ , ausgehend von den jeweiligen Minimumsgeometrien der beiden Carbinol-derivate, dargestellt. Die aufgetragenen Energien beziehen sich auf die mit dem AM1-Verfahren ermittelten globalen Minimumsenergien, die sich mit -137.02 kcal/mol für das Anthryltrifluorethanol respektive -185.70 kcal/mol für das Phenyltrifluorethanol berechnen. Man erkennt für beide Carbinole zwei Minima bei 50 und 180°, jedoch ist die Rotation der OH-Gruppe für das Anthryltrifluorethanol energetisch anspruchsvoller.

Abbildung 127 : Auftragung der Änderung der Konformationsenergie (bezogen auf die Minimumsenergien) in Abhängigkeit vom Torsionswinkel  $t_1$



Nur bei den heterochiralen Assoziaten ist eine Dimerisierung unter Erhalt der intramolekularen Wasserstoffbrücken in beiden Monomerbestandteilen möglich. Die Geometrieoptimierungen ergeben jedoch drastische Unterschiede für die heterochiralen Carbinoldimere dieses Typs. Der in Abbildung 128 dargestellte Komplex des Anthryltrifluorethanol zeigt eine antiparallele Ausrichtung der beiden wechselwirkenden OH-Gruppen unter Ausbildung zwei weiterer intermolekularer OH...F Wasserstoffbrücken. Die entsprechenden Torsionswinkel  $t_1$  und  $t_2$  werden nur geringfügig geändert ( $t_2 = 2.5^\circ$ ,  $t_3 = 25^\circ$ ).

Das Phenylderivat findet in der Geometrieoptimierung, trotz Vorgabe einer analogen Ausgangsstruktur, diese Geometrie nicht. Es wird als energetisches Minimum ein Komplex gefunden, der sich durch ein überaus kompliziertes Wasserstoffbrückennetzwerk auszeichnet (Abbildung 130). Diese Dimergeometrie ist dem Anthryltrifluorethanol dimer nicht zugänglich, da bei derartigen Wechselwirkungen der voluminöse Anthrylrest in Kontakt mit der OH-

Gruppe des anderen Moleküls geraten würde. (siehe Abbildung 131 : In dem mit einem Pfeil gekennzeichneten Raum käme es zur Kollision der beiden angesprochenen Substituenten.) Es kann daher im Falle des Anthryltrifluorethanol-Dimer II nur der in Abbildung 129 dargestellte, zweite heterochirale Komplex gebildet werden. Man beachte auch, daß in ihm eine der intramolekularen Wasserstoffbrücken zu Gunsten der intermolekularen Wechselwirkungen gelöst wird. In diesem Assoziat ist das gleiche Wechselwirkungsmuster wie im Phenylderivat realisiert, jedoch kann eines der Phenyltrifluorethanolmoleküle eine zusätzliche Wasserstoffbrückenbindung zu einem Fluoratom ausbilden. Eigentümlicherweise werden für das Anthrylcarbinoldimer noch zwei weitere Komplexe gefunden, die dem in Abbildung 129 dargestellten Wechselwirkungsprinzip unterliegen. Energetisch sind sie fast gleich zu dem heterochiralen Anthryltrifluorethanol-Dimer II. In Tabelle 60 sind noch einmal die wichtigsten Geometrieunterschiede der Assoziatfragmente mit Hilfe der Torsionswinkel  $t_1$ - $t_3$  zusammengefaßt.

Tabelle 60 : Vergleich der Torsionswinkel  $t_1$ ,  $t_2$  und  $t_3$  für die Dimere der Arylcarbinole

	$t_1/^\circ$	$t_2/^\circ$	$t_3/^\circ$	$t'_1/^\circ$	$t'_2/^\circ$	$t'_3/^\circ$
Anthryltrifluorethanol-Dimer I RS	-25.8	2.8	-76.8	25	2.8	76.8
Anthryltrifluorethanol-Dimer II RS	-41.3	5.5	-63.4	161.2	172.6	-21.8
Anthryltrifluorethanol-Dimer RR	64	178.6	*	-24.7	-4.2	76.1
Phenyltrifluorethanol-Dimer RS	46.6	-177	168	-45.6	164	-24.8
Phenyltrifluorethanol-Dimer RR	69.3	173.9	*	-43.6	-178.4	17.2

Die Torsionswinkel sind in der Tabelle 59 definiert. Mit dem Index ' werden die Winkel für das zweite Molekül im Dimer markiert. \* nicht zur Wasserstoffbrückenbindung befähigt

Abb. 128 : Heterochirales Anthryltrifluorethanol-Dimer I (Bildungsenthalpie -279.02 kcal/mol)

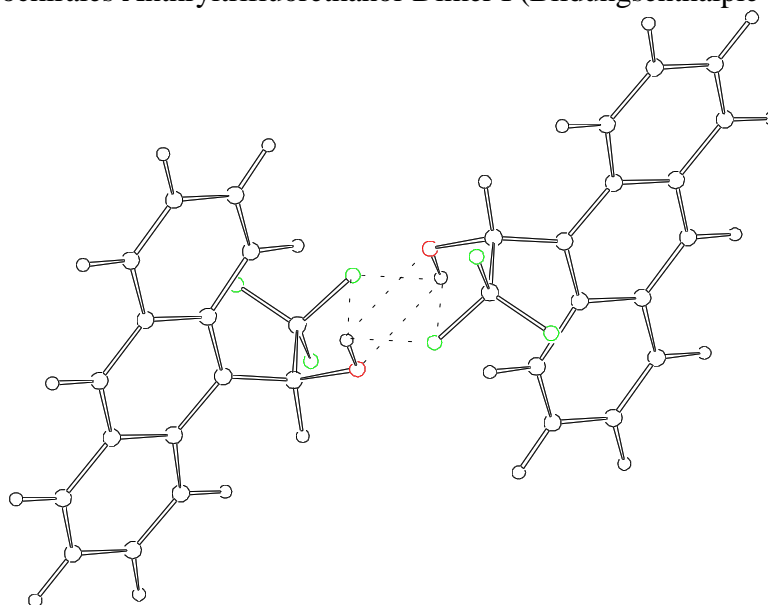




Abb. 129 : Heterochirales Anthryltrifluorethanol-Dimer II (Bildungsenthalpie -277.56 kcal/mol)

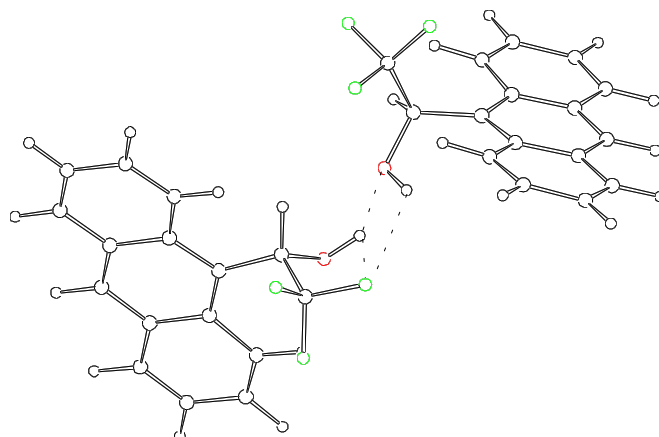


Abb. 130 : Heterochirales Phenyltrifluorethanol-Dimer (Bildungsenthalpie -375.50 kcal/mol)

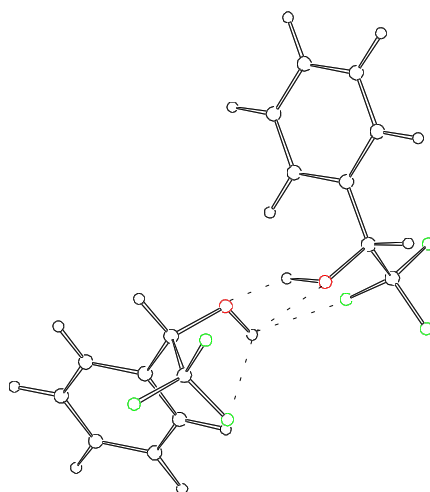
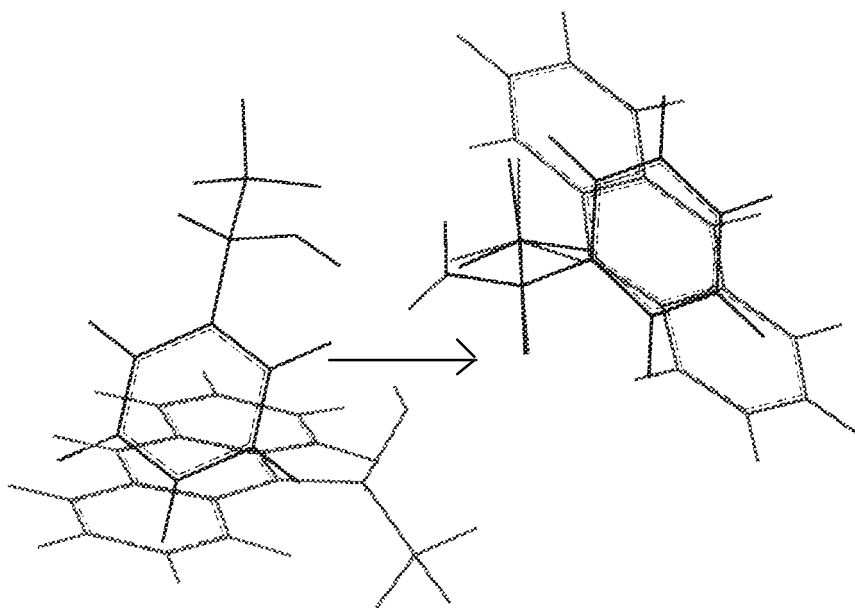
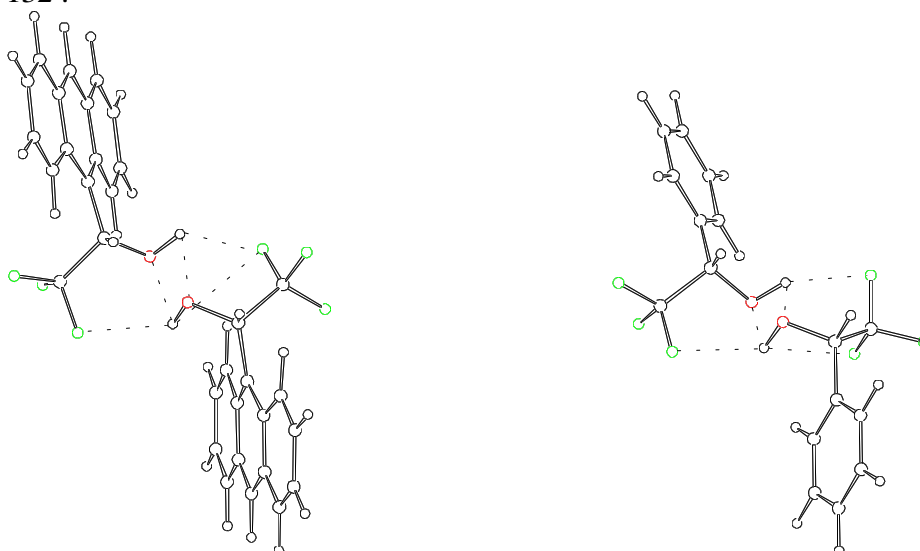


Abb. 131 : Überlagerung des heterochiralen Phenyltrifluorethanol-Dimers mit dem heterochiralen Anthryltrifluorethanol-Dimer II



Bei der Bildung der homochiralen Assoziate muß zwingend eine der intramolekularen Wasserstoffbrücken aufgebrochen werden. Die beiden Carbinolderivate zeigen prinzipiell ähnliche Minimumsgeometrien, wie auch aus der Abbildung 132 zu erkennen ist. In den Geometrieoptimierungen wird jeweils nur eine homochirale Dimergeometrie gefunden. Der Tabelle 60 kann man die Torsionswinkel in diesen Dimeren entnehmen. Tabelle 61 enthält die entsprechenden Bildungsenthalpien und Wechselwirkungsenergien der hier diskutierten Dimere.

Abbildung 132 :



homochirales Anthryltrifluorethanol-Dimer

homochirales Phenyltrifluorethanol-Dimer

Tabelle 61 : Bildungsenthalpien und Wechselwirkungsenergien der Arylcarbinoldimere

	Bildungsenthalpie /(kcal/mol)	Wechselwirkungsenergie /(kcal/mol)
Anthryltrifluorethanol-Dimer I RS	-279.02	-4.99
Anthryltrifluorethanol-Dimer II RS	-277.56	-3.62
Anthryltrifluorethanol-Dimer RR	-278.28	-4.25
Phenyltrifluorethanol-Dimer RS	-375.50	-4.09
Phenyltrifluorethanol-Dimer RR	-374.11	-2.74

Die mit dem AM1-Verfahren berechneten relativen Stabilitäten der zueinander diastereomeren Anthryltrifluorethanol-Dimere widersprechen den aus den Chromatogrammsimulationen geforderten Wechselwirkungsenergien. Auch wenn man die größere Anzahl an heterochiralen Dimeren, die energetisch über dem Anthryltrifluorethanol-Dimer RS I liegen, berücksichtigt, so läßt sich diese Diskrepanz nicht auflösen (3 Dimere vom Typ des Anthryltrifluorethanol-Dimers II: -277.56 kcal/mol, -277.28 kcal/mol, -277.10 kcal/mol). Mit Hilfe einer Boltzmannverteilung erhält man dann eine gemittelte Bildungsenthalpie von -4.53 kcal/mol. Eine Überschätzung der mit dem AM1-Verfahren berechneten Wechselwirkungsenergien der im Anthryltrifluorethanol-Dimer I gefundenen antiparallelen Wasserstoffbrückengeometrie muß aber auch in Erwägung gezogen werden. Schon für das Wasser-Dimer wird die energetische Reihenfolge

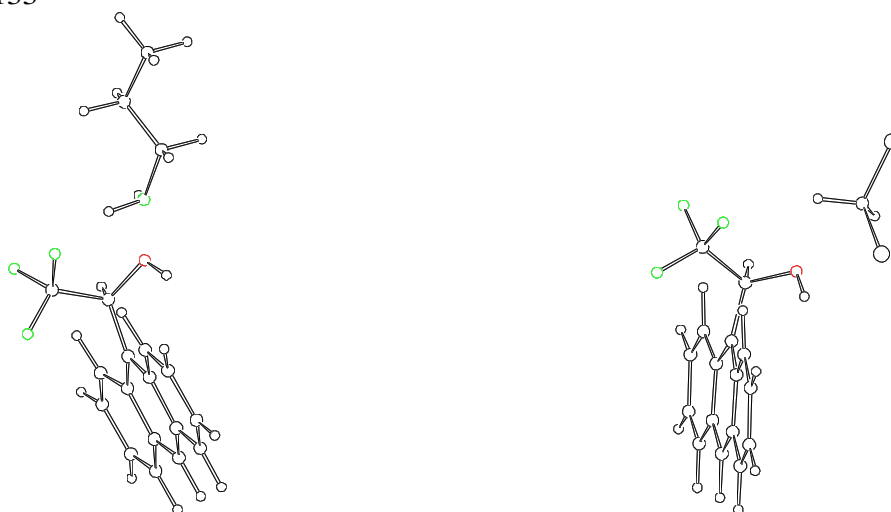
der Wechselwirkungsgeometrien gegenüber Ab-initio-Rechnungen und experimentellen Daten [40], die die translineare  $C_S$ -Geometrie als globales Minimum ermitteln, falsch wiedergegeben. Das AM1-Verfahren berechnet aber für die angegebenen Geometrien folgende Stabilisierungsenergien :

'bifurcated'  $C_{2v}$ : -5 kcal/mol, antiparallel: -3.59 kcal/mol, translinear  $C_S$ : -2.80 kcal/mol

Desweiteren finden das MNDO-M- und das PM3 Verfahren sowie die Kraftfeldmethoden (MM2, MM3, Amber) die Geometrie des Anthryltrifluorethanol-Dimers RS I nicht als Minimum oder bewerten die Anthryltrifluorethanol-Dimere RS II energetisch günstiger. Aus den genannten Gründen wird die für das Anthryltrifluorethanol-Dimers RS I berechnete Wechselwirkungsenergie als Artefakt aufgefaßt.

Im Gegensatz zu dem Phenylcarbinolen fällt der Energiegewinn durch die Assoziierung der Anthryltrifluorethanoles allgemein höher aus. Dies ist auf die ungünstigeren Ausgangsgeometrien für die Dimerbildung zurückzuführen. Das Anthrylcarbinol besitzt, als sterisch sehr gespanntes Monomer keine Möglichkeit, in stabilere Konformationen überzugehen. Dagegen kann das Phenylderivat, wenn keine Selbstassoziiierung vorliegt, eine für das Monomer günstigere Geometrie einnehmen, wodurch aber der Wechselwirkungsenergiegewinn in Bezug auf die Minimumsenergien verringert wird.

Abbildung 133



Anthryltrifluorethanol-Propylamin-Aggregat

Anthryltrifluorethanol-Dichlormethan-Aggregat

Die Wechselwirkung der Dimeren und Monomeren zum Propylamin bzw. Isopropanol wird nicht so ausführlich erörtert. Die monomeren Arylcarbinole zeigen keine prinzipiellen Unterschiede in den Aggregaten mit den Modellsustanzen für die mobile bzw. stationären Phase.

Das Propylamin bevorzugt eine Geometrie, in der die beiden am Stickstoffatom gebundenen Wasserstoffatome auf ein Fluoratom zeigen, während sich das einsame Elektronenpaar zum Wasserstoffatom der OH-Gruppe hin orientiert.

Verwendet man Dichlormethan als Modell für die mobile Phase so realisiert das Dichlormethanmolekül dieses Wechselwirkungsmuster, indem es eines der beiden Chloratome mit der OH-Gruppe wechselwirken läßt und eines der beiden Wasserstoffatome zu einem der Fluoratome hin ausrichtet. Die Aggregate des Propylamins mit den Arylcarbinolen sind in beiden Fällen stabiler als die entsprechenden Dichlormethankomplexe. Abbildung 133 gibt diese Geometrien exemplarisch für das Anthryltrifluorethanol wieder.

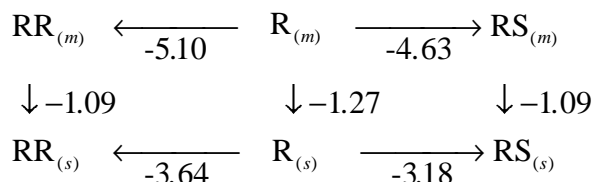
Bei der Aggregatbildung der Dimere mit den Modellsubstanzen der einzelnen Phasen wird das Propylamin- bzw. das Dichlormethanmolekül in das Wasserstoffbrückensystem der Dimere mit einbezogen. Dabei erweist sich der Komplex mit dem Propylamin als bedeutend günstiger, da das Dichlormethan zur Ausbildung der Wasserstoffbrücken einen bedeutend höheren Raumbedarf hat.

Die energetischen Verhältnisse werden nicht im Einzelnen diskutiert. Die berechneten Bildungsenthalpien und Wechselwirkungsenergien (bezogen auf die Minimumsenergien der Aggregatsbestandteile) sind in den Abbildungen 134 bzw. 135 mit aufgeführt.

#### 4.4.3. Vergleich der Chromatogrammsimulationen mit den AM1-Rechnungen.

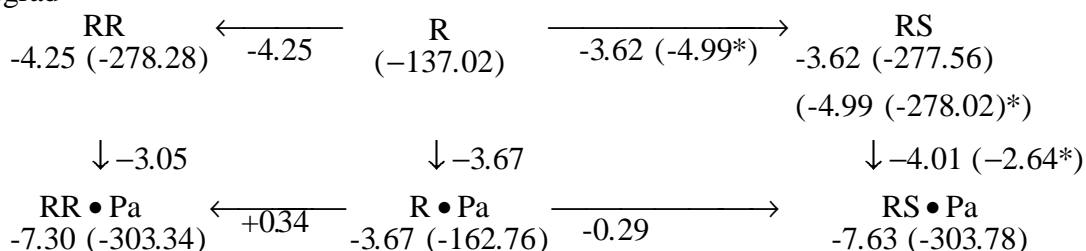
Abbildung 134 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des Anthryltrifluorethanol (siehe Erläuterung zu Abbildung 70, Seite 101, LM : Abkürzung für Dichlormethan)

Chromatogrammsimulation:



AM1-Rechnungen:

1. Approximationsgrad



\* Anthryltrifluorethanol-Dimer I RS

2. Approximationsgrad

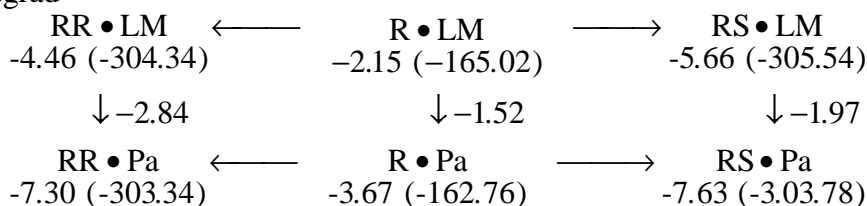
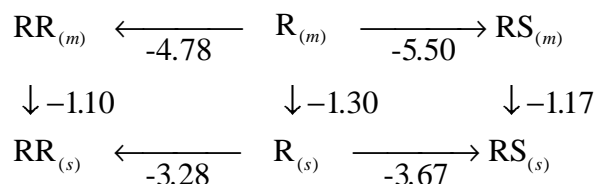


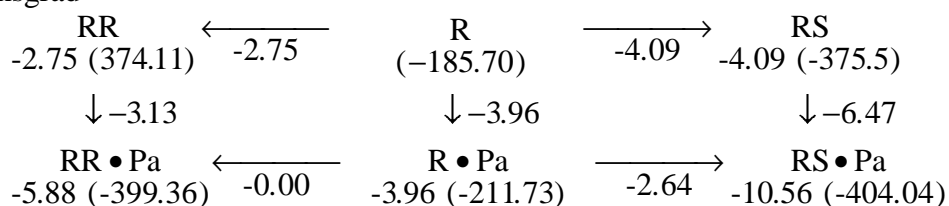
Abbildung 135 : Schematischer Vergleich der aus Chromatogrammsimulationen und den AM1-Rechnungen erhaltenen Energien für die Enantiomerenüberschußabtrennung des Phenyltrifluor-ethanols (siehe Erläuterung zu Abbildung 70, Seite 101, LM : Abkürzung für Dichlormethan)

Chromatogrammsimulation:

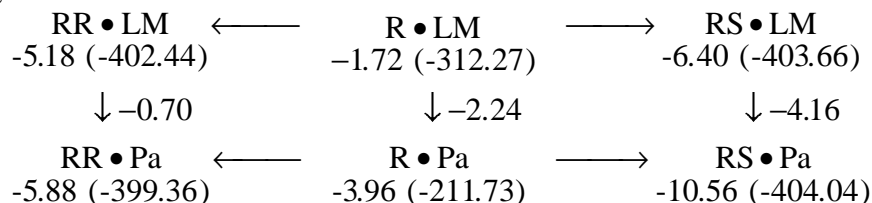


AM1-Rechnungen:

1. Approximationsgrad



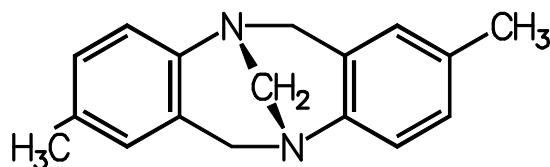
2. Approximationsgrad



Wie man den Diagrammen des 1. Approximationsgrades in den Abbildungen 134 bzw. 135 entnehmen kann, werden unter Berücksichtigung der Ausführungen zu den heterochiralen Anthryltrifluorethanol-Dimeren die Selbstassoziationen in der mobilen Phase für beide Arylcarbinole in einem akzeptablen Rahmen wiedergegeben. Im Vergleich mit den Chromatogrammsimulationen werden zwar mit dem AM1-Verfahren zu geringe Wechselwirkungsenergien berechnet, aber die relativen Stabilitätsunterschiede zwischen den homochiralen und heterochiralen Assoziaten werden dennoch gut reproduziert. Unter Vernachlässigung des heterochiralen Anthryltrifluorethanol-Dimers I wird für die beiden Arylcarbinole der Wechsel der diastereomeren Dimerstabilitäten durch das AM1-Verfahren erfaßt. Die Wiedergaben der Phasenübergänge sind dagegen in beiden Näherungsstufen von nicht so guter Qualität. Während im 2. Approximationsgrad die Kapazitätsfaktoren für die Monomere noch vertretbar ermittelt werden, wird die Affinität der Dimere zur stationären Phase mit dem AM1-Verfahren stark überschätzt.

#### 4.5.1. Simulation der Enantiomerenüberschußabtrennung der Trögerschen Base

Abbildung 136 :



Die Simulationen der Chromatogramme der Trögerschen Base gestalten sich sehr schwierig. Die von Heinzerling durchgeführten experimentellen Messungen sind in [4] dokumentiert. Einerseits zeigen die experimentellen Chromatogramme bei gleicher Probenaufgabe extreme Variationen, andererseits sind starke Unregelmäßigkeiten in den Retentionszeiten der nicht-racemischen Trennung gegenüber den Chromatogrammen der reinen Enantiomer- und der Racemataufgaben zu beobachten. (Offensichtlich sind die zubemerkenden Störungen der HPLC-Anlage unentdeckt geblieben.) Tabelle 62 faßt diese Problematik der experimentellen Ergebnisse zusammen. Die dort ebenfalls aufgeführten Daten, die durch Simulation der gemessenen Chromatogramme erhalten wurden, weisen auf eine gute Übereinstimmung mit den entsprechenden Chromatogrammen der Racemat- und der reinen Enantiomeraufgaben hin. Den sehr großen Aufgabemengenbereich können die verwendeten Simulationsparameter korrekt erfassen und die Abbildungen A100-A111 bestätigen ebenfalls mit ihren zufriedenstellenden Kurvenverläufen die Parameterwahl. Auch im Falle der Trennungen nichtracemischer Mischungen, auf deren zu geringe Retentionszeiten schon in Tabelle 62 hingewiesen wurde, konnten die relativen Retentionen  $\alpha$  in hervorragender Qualität reproduziert werden. Die gute qualitative Übereinstimmung der in den Abbildungen A102, A105, A108 und A111 graphisch dargestellten Chromatogramme ist trotz der Retentionszeitabweichungen bemerkenswert. Den hier gezeigten Simulationen liegt eine Dimerisierungsenergie von -5.05 kcal/mol zu Grunde. Wie eine derartig hohe Assoziatbildungsenergie der homochiralen bzw. heterochiralen Dimere realisiert werden kann, wird im nächsten Abschnitt an Hand von AM1-Rechnungen diskutiert.

Tabelle 62 : Vergleich der experimentellen [5] und simulierten Chromatogrammdaten der Trögerschen Base

Aufgabemenge/ 10 <sup>-6</sup> g	%ee	experimentell Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	experimentell Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α	simuliert Überschuß- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	simuliert Racemat- fraktion Rt <sub>max</sub> /min	k'1	k'2	t <sub>0</sub> /min	α
*100	100	18.76		5.75		2.78		18.75		5.75		2.78	
*100	0		19.40	5.98		2.78			19.76	6.11		2.78	
100	86	17.14	23.10	5.18	7.31	2.78	1.41	18.90	25.22	5.80	8.07	2.78	1.39
50	100	21.02		6.56		2.78		21.15		6.61		2.78	
50	0		21.63	6.78		2.78			22.08	6.94		2.78	
50	86	19.98	24.62	5.97	7.86	2.78	1.32	21.30	27.39	6.66	8.85	2.78	1.33
20	100	22.78 20.74		7.19 6.46		2.78		23.91		7.60		2.78	
20	0		22.96 22.32	7.26 7.03		2.78			24.65	7.87		2.78	
20	86	23.52	27.72	7.46	8.97	2.78	1.20	24.03	27.63	7.64	8.94	2.78	1.17
5	100	26.02		8.36		2.78		26.92		8.68		2.78	
5	0		27.06	8.73		2.78			27.38	8.85		2.78	
5	86	26.02	28.44	8.26	9.23	2.78	1.10	26.99	≈29	8.71	9.43	2.78	1.08

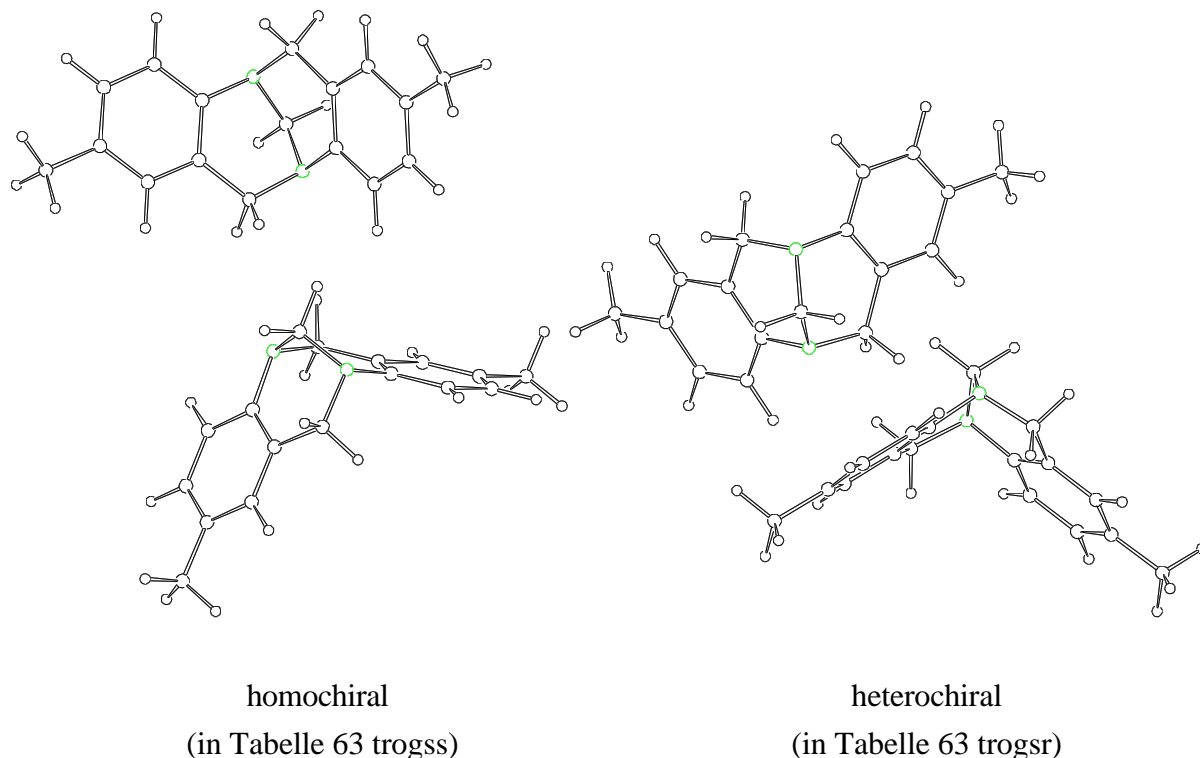
Parametersatz:

$k_{(RR)}$ :	2.38	$k_{(RS)}$ :	2.38
$k_{(R)}$ :	9.79		
$Km_{(RR)}$ :	5.0 10 <sup>3</sup> l/mol	$Km_{(RS)}$ :	5.0 10 <sup>3</sup> l/mol
$\beta$ :	1	Bodenzahl:	4000

\* Referenzchromatogramme, an denen die Parameter angepaßt wurden

#### 4.5.2. Versuche zur Berechnung der Assoziat der Trögerschen Base

Abbildung 137 : Assoziat der Trögerschen Base



Die Trögersche Base zeichnet sich durch ihr starres Molekülgerüst aus, das nur geringfügige Konformationsänderungen zuläßt. Ihre Bildungsenthalpie wurde mit 67.88 kcal/mol berechnet. Wechselwirkungsstellen zur Dimerisierung sind offensichtlich nicht vorhanden. Trotzdem wurde versucht, mit Hilfe der im Monomer vorgefundenen Partialladungsverteilung mögliche Dimergeometrien zu berechnen. Als einzige nicht-repulsive Assoziat werden die in Abbildung 137 dargestellten Geometrien gefunden. Tabelle 63 führt die Bildungsenthalpien und Wechselwirkungsenergien dieser Dimere auf (dort als trogss (homochiral) und trogsr (heterochiral) bezeichnet). Die berechneten Dimerisierungsenergien von -0.69 kcal/mol bzw. -0.93 kcal/mol reichen bei weitem nicht aus, daß eine Enantiomerenüberschußabtrennung, wie im Experiment beobachtet, stattfinden kann.

Der Versuch die Selbstassoziation der Trögerschen Base mit Hilfe eines Fließmittelmoleküls, das die Wechselwirkung zwischen den beiden Monomeren vermittelt, zu erklären, erweist sich ebenfalls als nicht erfolgreich. Die Wechselwirkungsenergie von Trimeren, bestehend aus 2 Trögerschen Basen und einem Dichlormethan, das in der Trennung als Fließmittel verwendet wurde, betrug maximal -2.62 kcal/mol. (in der Tabelle 63 als trogss\_CH2Cl2 (homochiral) bzw. trogsr\_CH2Cl2 (heterochiral) aufgeführt)



Tabelle 63 : Dimere bzw. Trimere der Trögerschen Base

a: Gesamtenergie des Komplexes H und Energien der Fragmente im Aggregat H(Substruktur)<sub>A</sub>

Substruktur	H <sub>A</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	trog1 trog2	trog1 LM	trog2 LM	trog1	trog2	LM
trogss	135,07	135,07	-	-	67,88	67,88	-
trogssr	134,83	134,84	-	-	67,88	67,88	-
trogss_CH2Cl2	107,39	134,98	40,89	40,82	67,89	67,90	-25,83
trogssr_CH2Cl2	107,29	135,50	40,89	40,82	67,89	67,89	-25,83
trogss_H2O	71,95	135,60	6,62	6,31	67,93	67,89	-59,24
trogssr_H2O	71,64	135,19	6,63	6,32	67,92	67,91	-59,24

b: Wechselwirkungsenergien W<sub>A</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>A</sub> bezogen auf das Aggregat

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	trog1 trog2	trog1 LM	trog2 LM
trogss	-0,69	-0,69	-	-
trogssr	-0,93	-0,93	-	-
trogss_CH2Cl2	-2,57	-0,80	-1,17	-1,25
trogssr_CH2Cl2	-2,65	-0,28	-1,16	-1,24
trogss_H2O	-4,63	-0,22	-2,07	-2,35
trogssr_H2O	-4,95	-0,64	-2,06	-2,34

c: Wechselwirkungsenergien W<sub>M</sub> bzw. W(Substruktur)<sub>M</sub> bezogen auf die Minimumsenergien

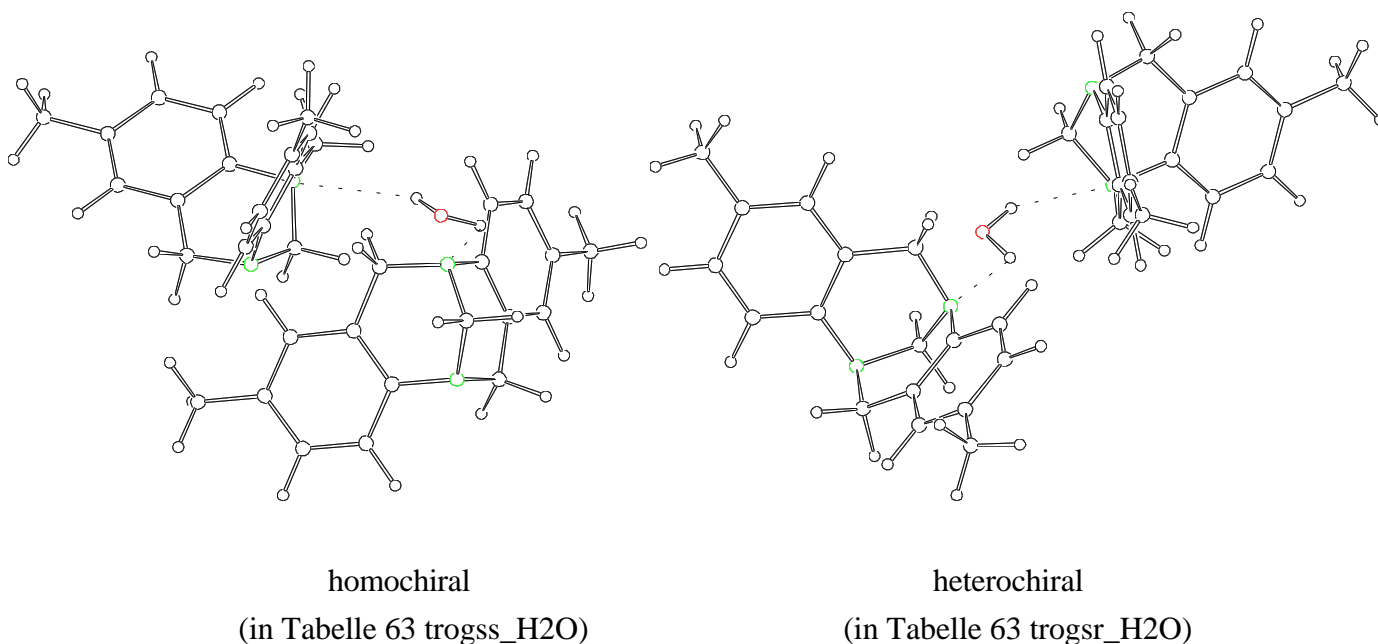
Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	trog1 trog2	trog1 LM	trog2 LM	trog1	trog2	LM
trogss	-0,69	-0,69	-	-	0,00	0,00	-
trogssr	-0,93	-0,92	-	-	0,00	0,00	-
trogss_CH2Cl2	-2,52	-0,78	-1,14	-1,21	0,01	0,02	0,02
trogssr_CH2Cl2	-2,62	-0,26	-1,14	-1,21	0,01	0,01	0,02
trogss_H2O	-4,57	-0,16	-2,02	-2,33	0,05	0,01	0,00
trogssr_H2O	-4,88	-0,57	-2,01	-2,32	0,04	0,03	0,00

(Abkürzungen: trog = Trögersche Base, LM = Zur Trimerbildung verwendetes Lösungsmittelmolekül)

In einem dritten Ansatz wurde die Trimerisierung der zwei Trögerschen Basen unter Vermittlung eines Wassermoleküls angenommen. Diese Annahme erscheint gerechtfertigt, da das chromatographische System meistens mit Wasser verunreinigt ist. Zum Beispiel sind auf Grund der unvollständig mit Propylamin derivatisierten stationären Phase noch vorhandene OH-Gruppen mit Wassermolekülen abgesättigt. Auch das Fließmittel soll normalerweise mit Wasser standardisiert sein<sup>1</sup>. Für die unter Mitwirkung eines Wassermoleküls gebildeten Aggregate der Trögerschen Base berechnet das AM1-Verfahren eine Wechselwirkungsenergie von -4.68 kcal/mol (homochiral) bzw. -4.57 kcal/mol (heterochiral). (in der Tabelle 63 als trogss\_H2O (homochiral) bzw. trogssr\_H2O (heterochiral) aufgeführt) Diese Ergebnisse stehen im Einklang mit den aus den Simulationen geforderten freien Energien. Die diesen Rechnungen zu Grunde liegenden Geometrien sind in Abbildung 138 dargestellt.

<sup>1</sup> Dazu wird mit Wasser gesättigtes Dichlormethan mit dem gleichem Volumen trockenem Dichlormethan gemischt.

Abbildung 138 : Aggregate von zwei Molekülen der Trögerschen Base mit einem Wassermolekül



Hiermit kann mit Hilfe der Chromatogrammsimulationen und der AM1-Rechnungen ein tragfähiges Modell für die Enantiomerenüberschußabtrennung der Trögerschen Base vorgeschlagen werden. Die angenommene Bedeutung des Wassermoleküls wird auch durch experimentelle Untersuchungen von Hanenberg [57] gestützt, der den Einfluß unterschiedlicher Sättigungsgrade des chromatographischen Systems mit Wasser auf die Chromatographie der Trögerschen Base untersuchte.

Die verblüffend ähnlichen Dimerisierungsenergien aus den AM1-Rechnungen und den Chromatogrammsimulationen können als Indiz für die Mitwirkung eines Wassermoleküls bei der Enantiomerenüberschußabtrennung der Trögerschen Base aufgefaßt werden. Auch finden die experimentellen Schwierigkeiten, ein Chromatogramm angemessen zu reproduzieren, in der unterschiedlichen Wassersättigung des chromatographischen Systems eine mögliche Erklärung. Desweiteren wird mit der hier angenommenen Trimerenbildung unter Vermittlung eines Wassermoleküls gezeigt, daß der Anwendungsbereich der Enantiomerenüberschußabtrennung auch auf bis jetzt noch nicht berücksichtigte Substanzklassen erweitert werden kann.

## 5. Entwicklung eines Algorithmus zur Berechnung von Chromatogrammen der Enantiomerenüberschußabtrennung

### 5.1. Berechnung chromatographischer Trennungen an chiralen Phasen

Versuche, den chromatographischen Trennprozeß von Enantiomeren an chiralen stationären Phasen, bei dem keine Reaktionen der Aufgabepollen untereinander beobachtet werden, mit Hilfe von quantenchemischen Methoden oder Kraftfeldverfahren zu erfassen, sind in der Literatur schon häufiger beschrieben worden [61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71]. Die Gegenüberstellung von Experiment und Rechnung ist hier sehr einfach. Für die Trennung von Enantiomeren an einer chiralen stationären Phase gilt nämlich :

$$\alpha = \frac{k_R}{k_S} = \exp\left(-\frac{\Delta G_{RsP} - \Delta G_{SsP}}{RT}\right) \quad \text{wenn } k_R > k_S \quad (77)$$

$k_R$  : Kapazitätsfaktor des R-Enantiomers zur chiralen Phase

$k_S$  : Kapazitätsfaktor des S-Enantiomers zur chiralen Phase

$\Delta G_{RsP}$  : Freie Energie des Aggregats aus R-Enantiomer und chiraler stationärer Phase

$\Delta G_{SsP}$  : Freie Energie des Aggregats aus S-Enantiomer und chiraler stationärer Phase

Der Vergleich mit dem Experiment wird meistens nur qualitativ durchgeführt und als Erfolg angesehen, wenn die berechnete relative Retention  $\alpha$  nur 50% vom experimentellen Wert abweicht.

Da man die Chromatogramme eindeutig und relativ einfach interpretieren kann, sind hier Simulationen nicht notwendig.

### 5.2. Bisherige Verfahren zur Berechnung der Enantiomerenüberschußtrennungen an achiralen Phasen

Einerseits ist die Enantiomerenüberschußabtrennung im Gegensatz zur Separation von Enantiomeren an chiralen Phasen durch die nichtenantioselektive stationäre Phase bei ebenfalls nichtenantioselektiver mobiler Phase gekennzeichnet. Andererseits schließen die vielfältigen Reaktionsmöglichkeiten der Monomere und Dimere die auch nur näherungsweise Berechnung der relativen Retentionen  $\alpha$  gemäß Gleichung (77) explizit aus. Wie das im Kapitel 2 vorgestellte Modell zeigt, ist der Vergleich experimenteller Chromatogramme mit den Ergebnissen aus Kraftfeld- bzw. quantenchemischen Rechnungen nicht so einfach durchzuführen.

Ein Programm zur Simulation von Trennprozessen, das auch Reaktionen der Aufgabepollen untereinander berücksichtigt, wurde erstmalig von Schurig und Jung entwickelt [72]. Es basiert ebenso auf dem theoretischen Trennbodenmodell wie das hier vorgestellte Verfahren. In den Verwaltungsroutinen sind beide Programme äquivalent, dagegen unterscheiden sie sich in theoretischer und programmtechnischer Hinsicht in der Berechnung des in Gleichung (5) wiedergegebenen 'Gleichgewichtssystems'.

1. Das Programm von Schurig basiert nicht auf Gleichgewichtskonstanten, sondern auf den entsprechenden Geschwindigkeitskonstanten. Das daraus folgende Gleichungssystem wird in ein Differentialgleichungssystem überführt und mit dem Runge-Kutta Algorithmus [73] gelöst. Hieraus resultieren in mehrfacher Hinsicht ernsthafte Probleme:

- a. Die Definition des Trennbodens fordert Gleichgewichtszustände in jedem Trennboden. Schurig und Jung betrachteten die Prozesse bei der Enantiomerenüberschußabtrennung aber als zeitabhängig und stehen damit im Widerspruch zur Trennbodendefinition.
- b. Der verwendete Algorithmus ist nicht geeignet, das hier vorliegende 'steife Differentialgleichungssystem' zu lösen. In den Erläuterungen zu dem verwendeten Programm wird ausdrücklich darauf hingewiesen [74, 75, 76]. Deshalb blieben auch alle Versuche [11, 12], mit diesem Algorithmus Enantiomerenüberschußabtrennungen zu berechnen, auf qualitativ sehr niedrigem Niveau. Von den Autoren wurde auch gar nicht in Erwägung gezogen, experimentelle Chromatogramme zu simulieren. Der Versuch mit dem Programm quantitative Ergebnisse zu erhalten, scheitert kläglich. Entweder konnte das differentielle Gleichungssystem numerisch nicht gelöst werden oder aber die benötigten Rechenzeiten überschritten die verfügbaren Kapazitäten. Im Rahmen der Simulation eines experimentellen Chromatogramms des Binaphthols, wie es z.B. in Kapitel 4.1.1 zu finden ist, benötigte der Runge-Kutta-Algorithmus (auf einer Silicon Graphics 4D25) zur Berechnung der Gleichgewichte eines einzigen Bodens bisweilen über 1 h Rechenzeit. Daraus folgt bei einer 60 minütigen Simulationsdauer der chromatographischen Prozesse in einer Säule eine geschätzte Rechenzeit von mehreren Jahren. (Im übrigen ist das Differentialgleichungssystem für das von Schurig und Jung vorgeschlagene Modell der Enantiomerenüberschußabtrennung auch analytisch als 'Riccatische Differentialgleichung' lösbar [77], die das Differentialgleichungssystem sehr viel effizienter berechnen kann.)

2. Das zur Gleichung (5) analoge Reaktionsgleichungssystem wurde in dem Programm von Schurig und Jung unzulässig vereinfacht. In der mobilen Phase wird die thermodynamische Stabilität der homochiralen und heterochiralen Dimere als gleich angenommen. Die theoretischen Herleitungen zur Enantiomerenüberschußabtrennung im Kapitel 2 und die Simulationen experimenteller Chromatogramme im Kapitel 4 beweisen aber, daß diese Annahme in keinsten Weise gerechtfertigt ist und daß damit wichtige, die Enantiomerenüberschußabtrennung bestimmende Faktoren gar nicht berücksichtigt werden.

Aus den geschilderten Gründen war das Programm von Jung und Schurig auf die hier vorgestellten experimentellen Chromatogramme nicht anwendbar und es mußte ein eigener Algorithmus zur Berechnung des Gleichgewichtsgleichungssystem (5) und des aus ihm resultierenden Polynom 4. Grades (44) entwickelt werden.

### 5.3. Verfahren zur Lösung eines Polynom 4.Grades

Eine Gleichung vierten Grades ist sowohl analytisch als auch numerisch lösbar. Beide Verfahren werden hier kurz vorgestellt und ihre Anwendbarkeit diskutiert.

#### 5.3.1. Analytische Lösung eines Polynoms 4.Grades

Das Polynom 4.Grades (44) wird in die Form der Gleichung (78) überführt.

$$ax^4 + bx^3 + cx^2 + dx + e = 0 ; \quad a, b, c, d, e \text{ reell } a \neq 0 \quad (78)$$

Die 'reduzierte Gleichung' (79) erhält man mit der Substitution  $y = x + \frac{b}{4a}$

$$y^4 + py^2 + qy + r = 0 \quad (79)$$

Mit den Koeffizienten der ' reduzierte Gleichung' (79) kann dann die kubische Resolvente (80) gebildet werden.

$$z^3 + 2pz^2 + (p^2 - 4r)z - q^2 = 0 \quad (80)$$

Aus den Lösungen der kubische Resolvente (80) können dann mit den Gleichungen (81), (82), (83) und (84)

$$y_1 = \frac{1}{2}(\sqrt{z_1} + \sqrt{z_2} + \sqrt{z_3}) \quad (81)$$

$$y_2 = \frac{1}{2}(\sqrt{z_1} - \sqrt{z_2} - \sqrt{z_3}) \quad (82)$$

$$y_3 = \frac{1}{2}(-\sqrt{z_1} + \sqrt{z_2} - \sqrt{z_3}) \quad (83)$$

$$y_4 = \frac{1}{2}(-\sqrt{z_1} - \sqrt{z_2} + \sqrt{z_3}) \quad (84)$$

unter der Vorzeichenkonvention

$$q = \sqrt{z_1} \sqrt{z_2} \sqrt{z_3} \quad (85)$$

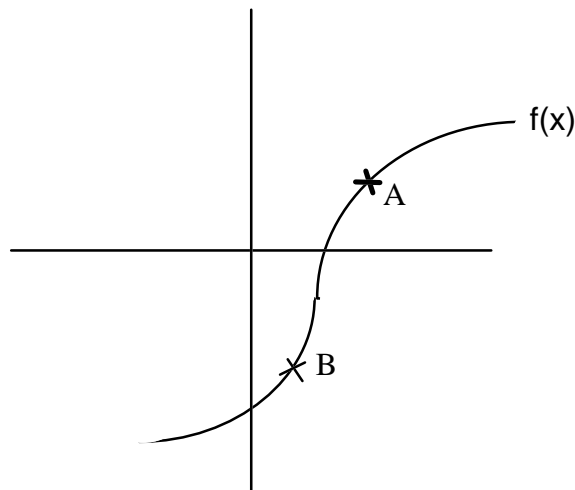
die Lösungen der ' reduzierten Gleichung' (80) gewonnen werden. Bei entsprechender Rücksubstitution  $x = y - \frac{b}{4a}$  sind dann auch die Lösungen des Polynoms (79) zugänglich. Aus dem

hier kurz umrissenen Lösungsweg sind die numerischen Probleme bei der analytischen Lösung des Polynoms (44) erkennbar. Damit das in Gleichung (5) dargestellte chemische Gleichgewicht berechnet werden kann, müssen Lösungen für  $x$  im Bereich von 1 bis  $10^{-20}$  in Betracht gezogen werden. Während man das Polynom 3.Grades (80) vielleicht noch effizient lösen kann [74, 78], so ergeben sich durch geringfügige Rundungsfehler und negative  $z$ -Werte bisweilen nur komplexe Lösungen für  $y$ , von denen zumindest zwei reell sein müssen. Zur Simulation eines Chromatogramms des Binaphtols, wie in Kapitel 4.1.1 geschildert, wurden 500 Böden, eine Totzeit von 3 min und eine Simulationsdauer von 60 min verwendet. Zur Berechnung einer solchen Trennung muß dann das Polynom 4.Grades (44)  $5 \cdot 10^6$  mal über einen relativ großen Konzentrationsbereich gelöst werden. Testrechnungen zeigten, daß dies auf dem analytischen Lösungsweg nicht realisierbar ist.

### 5.3.2. Numerische Verfahren zur Lösung eines Polynoms 4.Grades

Es wurden eine Reihe von numerischen Algorithmen zur Berechnung der Nullstellen eines Polynoms getestet. Zum Teil kann man sie nur theoretisch beschreiben der *Einführung in die Numerische Mathematik* [79] oder andererseits als Quellcodes den *Numerical Recipes* [74] entnehmen. Allen Programmen liegt vom Prinzip her die gleiche Vorgehensweise zu Grunde.

Abbildung 139 :



Für die in Abbildung 139 wiedergegebene Funktion wird zuerst ein Vorzeichenwechsel gesucht. Werden für dieses Problem die beiden Punkte A und B gefunden, kann die eigentliche Suche nach einer Nullstelle beginnen. Die einzelnen Algorithmen unterscheiden sich in der Methode, wie die Nullstelle approximiert wird und wie neue bessere Stützpunkte A' und B' gefunden werden. Zum Beispiel in der Bisektionsmethode wird der Wert der Funktion  $f(x)$  am Mittelpunkt der Verbindungslinie zwischen A und B berechnet und anschließend der Wert auf sein Vorzeichen untersucht. Durch ihn können dann neue Grenzen festgelegt werden, in denen der Nullpunkt liegen muß. Diese Prozedur wird bis zur gewünschten Genauigkeit wiederholt. Auch ist es möglich, die Steigung der Funktion in A und B zu verwenden, um näherungsweise den Nullpunkt zu berechnen.

Die Methoden sind vielfältig, aber man kann schon an Hand der bereits dargestellten Methoden erkennen, wie schwierig es ist, die benötigte Genauigkeit zu erhalten. Unterscheiden sich die in einen Boden eingesetzten Konzentrationen an R- und S-Teilchen um 4 Zehnerpotenzen, so kann im Rahmen des Algorithmus die gewünschte Genauigkeit erreicht werden. Berechnet man aber zur Probe aus der erhaltenen Lösung die Konzentrationen an Dimeren und Monomeren und überprüft den Teilcheninhalt an R und S, so ist zwar die Gesamtteilchenanzahl konstant, aber der Inhalt an R bzw. S-Teilchen stimmt nicht mehr mit den entsprechenden eingesetzten Ausgangskonzentrationen überein. Keines der in den 'Numerical Recipes' aufgeführten Verfahren konnte über den benötigten Konzentrationsbereich zuverlässige Ergebnisse liefern.

#### 5.4. Algorithmus zur Berechnung der Gleichgewichte in einem theoretischen Boden

Aus den Erfahrungen mit den bis jetzt vorgestellten Programmen sind folgende Forderungen an den zu entwickelnden Algorithmus zu stellen.

- a. Er muß schnell sein, so daß ein Chromatogramm im Laufe eines Tages simuliert werden kann.
- b. Die Genauigkeit muß ausreichen, daß damit die Konzentration an R- und S-Teilchen vor und nach der Gleichgewichtsberechnung konstant bleibt.
- c. Er muß so stabil sein, daß er den geforderten Konzentrationsbereich der Aufgabemengen bewältigen kann.

Diese Zielsetzungen mögen zwar trivial erscheinen, aber die geschilderten Erfahrungen weisen auf die zu erwartenden Schwierigkeiten hin.

Zur Berechnung der Gleichgewichte in einem theoretischen Boden wurde deshalb ein Algorithmus entwickelt, der die Lösungen problemspezifischer sucht.

$$2a [R_{(m)}]^2 + b [R_{(m)}] [S_{(m)}] + c [R_{(m)}] = C(R) \quad (42)$$

$$2a [S_{(m)}]^2 + b [R_{(m)}] [S_{(m)}] + c [S_{(m)}] = C(S) \quad (43),$$

Wenn man in der Gleichung (42)  $[S_{(m)}]$  als Konstante auffaßt, so wird (42) zu einer einfachen quadratischen Gleichung. Da eine Lösung der Gleichung (42) chemisch sinnvoll sein muß, das heißt reell und positiv, muß nach dem Fundamentalsatz der Algebra die zweite Lösung ebenfalls reell sein. Aus dem Vietschen Wurzelsatz folgt, da alle Koeffizienten reell sind, daß die zweite Lösung negativ sein muß. Wenn man (42) als quadratische Gleichung löst, wird somit festgelegt, daß nur

$$[R_m] = \frac{-(b[S_m] + c) + \sqrt{(b[S_m] + c)^2 + 8aC(S)}}{4a} \quad (86)$$

chemisch sinnvoll ist. Analoges gilt für Gleichung (43).

Das gekoppelte Gleichungssystem (42,43) kann mit folgendem Ansatz iterativ gelöst werden. In einem ersten Näherungsschritt wird angenommen, daß die zur Lösung von Gleichung (42) benötigte Konzentration  $[S_{(m)}]$  gleich der Ausgangskonzentration  $C(S)$  sei. Um die für  $[S_{(m)}]$  angenommene Konzentration als Approximation hervorzuheben, wird sie X genannt.

$$X = [S_{(m)}] = C(S) \quad (87)$$

Die Beziehung (42) kann dann mit der Substitution Y als Näherung für die tatsächliche Konzentration  $[R_{(m)}]$

$$Y = [R_{(m)}] \quad (88)$$

als quadratische Gleichung gelöst werden

$$2a Y^2 + (b X + c) Y - C(R) = 0. \quad (89)$$

Von den Lösungen der Gleichung (89) ist, wie schon hergeleitet, nur eine chemisch sinnvoll. Mit der erhaltenen Konzentration  $Y$  wäre das gekoppelte Gleichungssystem (42,43) für eine höhere Gesamtkonzentration  $C(S)'$  korrekt gelöst.

$$C(S)' = 2a X^2 + (b Y + c) X \quad (90)$$

wobei

$$C(S)' > C(S) \quad (91).$$

Man kann mit

$$F(S) = C(S) - C(S)' \quad (92)$$

den durch die Approximationen eingeführten Fehler  $F(S)$  zwischen der angenommenen Gesamtkonzentration  $C(S)'$  und der tatsächlichen Gesamtkonzentration  $C(S)$  definieren.

Durch sukzessive Erniedrigung von  $X$  würde sich die Gesamtkonzentration  $C(S)'$  immer weiter der tatsächlichen Konzentration  $C(S)$  annähern und mit

$$C(S)' = C(S) \quad (93)$$

wäre dann das Gleichungssystem (42,43) richtig gelöst.

Durch Lösung von Gleichung (43) mit der Konzentration  $Y$  als Näherung für die tatsächliche Konzentration  $[R_{(m)}]$

$$2a X'^2 + (b Y + c) X' = C(S) \quad (94)$$

kann eine neue Konzentration an monomeren S-Teilchen  $X'$  berechnet werden, die kleiner als  $X$  ist und der gesuchten tatsächlichen Konzentration  $[S_{(m)}]$  ähnlicher ist .

Auch für die Gesamtkonzentration  $C(R)$  läßt sich ein sogenannter Fehler  $F(R)$  definieren. Unter Berücksichtigung des Wertes  $X'$  wird mit Gleichung (95)  $C(R)'$  berechnet

$$C(R)' = 2a Y^2 + (b X' + c) Y \quad (95)$$

und es ergibt sich analog zu (92) der Fehler  $F(R)$ .

$$F(R) = C(R) - C(R)' \quad (96)$$

Hiermit ist das iterative Schema zur Lösung des gekoppelten Gleichungssystems (42,43) vorgegeben. Nähert man die tatsächliche Konzentration  $[S_{(m)}]$  wiederholt, diesmal aber mit der Konzentration  $X'$  , setzt diese in Gleichung (89) ein und durchläuft alle relevanten Schritte bis Gleichung (96) erneut, so erhält man wiederum genauere Approximationen für die gesuchten tatsächlichen Konzentrationen  $[S_{(m)}]$  und  $[R_{(m)}]$ .

Nach der Initiierung ergibt sich dann folgendes allgemeines Iterationsschema (der Index  $n$  gibt den Iterationsschritt an) :

$$Y_n = \frac{-(bX_{n-1} + c) + \sqrt{(bX_{n-1} + c)^2 + 8aC(R)}}{4a} \quad (97)$$



$$C(S)_n' = 2a X_{n-1}^2 + (b Y_n + c) X_{n-1} \quad (98)$$

$$F(S)_n = C(S) - C(S)_n' \quad (99)$$

$$X_n = \frac{-(bY_n + c) + \sqrt{(bY_n + c)^2 + 8aC(S)}}{4a} \quad (100)$$

$$C(R)_n' = 2a Y_n^2 + (b X_n + c) Y_n \quad (101)$$

$$F(R)_n = C(R) - C(R)_n' \quad (102)$$

Als Abbruchskriterium für die Iterationen werden die Fehler der berechneten Gesamtkonzentration  $C(R)'$  bzw.  $C(S)'$  herangezogen. Je nachdem welche Ausgangskonzentration kleiner ist, gilt :

$$C(R) > C(S) : \quad C(R) < C(S) : \quad (103)$$

$$\left| 1 - \frac{C(R)_n'}{C(R)} \right| < 10^{-20} X_n \quad \left| 1 - \frac{C(R)_n'}{C(R)} \right| < 10^{-20} Y_n \quad (104 \text{ a,b})$$

$$\left| 1 - \frac{C(S)_n'}{C(S)} \right| < 10^{-20} X_n \quad \left| 1 - \frac{C(S)_n'}{C(S)} \right| < 10^{-20} Y_n \quad (105 \text{ a,b})$$

Sind, je nach Fallunterscheidung, die in Beziehung (104) und (105) angegebenen Relationen erfüllt, so wird das gekoppelte Gleichungssystem (42,43) als gelöst betrachtet.

Die Konvergenz des hier vorgestellten Algorithmus kann bewiesen werden, aber eine Darstellung dieses Beweises würde die eigentliche Thematik dieser Arbeit zu weit verlassen.

Da ein möglicher Konzentrationsbereich von 1 bis  $10^{-20}$  mol/l für  $[S_{(m)}]$  bzw.  $[R_{(m)}]$  zu erfassen ist, ergaben sich bei großen Konzentrationsunterschieden zwischen  $[S_{(m)}]$  und  $[R_{(m)}]$  compilerspezifische Probleme. Gängige Compiler arbeiten nur mit einer Mantissengenauigkeit von 8 Stellen. Wie aus der Numerik bekannt ist, können sich hieraus ergebende Probleme mit einem 'sauberen Programmierstil' behoben werden ('truncation error'). Ein zu diesem Sachverhalt analoges Problem trat auf, wenn kleine S-Konzentrationen gegenüber hohen R-Konzentrationen zu berücksichtigen waren (oder umgekehrt). Der Algorithmus schien nach einem anfänglich guten Start nicht mehr zu konvergieren. Das Abbruchkriterium wurde nicht erreicht und die Differenz der Fehler zweier aufeinander folgender Iterationen veränderte sich nicht mehr. In diesem Falle wird eine Erweiterung des Algorithmus angewandt.

Wenn die fehlende Konvergenz der Iterationen lediglich auf einer nicht ausreichenden Genauigkeit der Zahlendarstellung der berechneten Konzentration Y beruht, so kann die gesuchte Lösung in einen schon korrekt berechneten Teil Y und einen Teil  $Y_1$ , der die nicht signifikanten Bits enthält, aufgespalten werden.

$$2a (Y+Y_1)^2 + (b X + c) (Y+Y_1) - C(R) = 0 \quad (106)$$

Ausmultiplizieren von (106) führt zu

$$2a Y^2 + (b X + c) Y + 2a Y_1^2 + 4a Y Y_1 + (b X + c) Y_1 - C(R) = 0 \quad (107)$$

Unter Berücksichtigung des oben geschilderten Ansatzes stellt Y die korrekte Lösung zu einer Gesamtkonzentration C(R)' dar, während mit Y<sub>1</sub> der Fehler erfaßt werden soll. Folglich kann man die ersten beiden Terme in Gleichung (107) durch Gleichung (95 bzw. 101) mit C(R)' substituieren.

$$2a Y_1^2 + (4a Y + b X + c) Y_1 - C(R) + C(R)' = 0 \quad (108)$$

Durch Lösen von Gleichung (108) kann dann die Gesamtkonzentration C(R)'' berechnet werden, für die Gleichung (106) korrekt gelöst wurde.

$$C(R)'_1 = 2a Y_1^2 + (4a Y + b X + c) Y_1 \quad (109)$$

$$C(R)'' = C(R)'_1 + C(R)' \quad (110)$$

Zur Berechnung von X ist zunächst die Gleichung

$$2a X^2 + (b Y + b Y_1 + c) X - C(S) = 0 \quad (111)$$

zu lösen. Mit

$$C(S)' = 2a X^2 + (b Y + b Y_1 + c) X \quad (112)$$

wird die durch Gleichung (106) bedingte geänderte Gesamtkonzentration C(S)' berechnet. Ist auf Grund weiterer 'truncation errors'

$$\left| 1 - \frac{C(S)'}{C(S)} \right| > 0 \quad (113)$$

erfüllt, so wird analog zur obigen Vorgehensweise auch X aufgespalten, nämlich in X (korrekte Lösung zu (112)) und in X<sub>1</sub> (neue Variable zur Erfassung des Fehlers).

$$2a X_1^2 + (4a X + b Y + b Y_1 + c) X_1 - C(S) + C(S)' = 0 \quad (114)$$

Mit der Lösung der Quadratischen Gleichung (114)

$$C(S)'_1 = 2a X_1^2 + (4a X + b Y + b Y_1 + c) X_1 \quad (115)$$

kann dann die Gesamtkonzentration C(S)'' berechnet werden, die die Gleichung (113) mit den berechneten X und X<sub>1</sub> erfüllt.

$$C(S)'' = C(S)'_1 + C(S)' \quad (116)$$

Die Konzentration C(R)'' muß nun nocheinmal erneut unter Berücksichtigung der neuen X und X<sub>1</sub>-Werte berechnet werden.

$$C(R)'' = 2a (Y + Y_1)^2 + (b (X + X_1) + c) (Y + Y_1) \quad (117)$$

In analoger Weise ist zu verfahren, falls die fehlende Konvergenz auf eine nicht ausreichende Genauigkeit der Zahlendarstellung der (mit Hilfe des Iterationsschemas (97)-(102) berechneten) Konzentration X zurückzuführen ist.

Damit ist die Initiierung für das erweiterte Iterationsschema gegeben. Die modifizierte Iterationsvorschrift ergibt sich dann als :

$$Y_{(n)} = \frac{-(bX_{(n-1)} + bX_{1(n-1)} + c) + \sqrt{(bX_{(n-1)} + bX_{1(n-1)} + c)^2 + 8aC(R)}}{4a} \quad (118)$$

$$C(R)'_{(n)} = 2aY_{(n)}^2 + (bX_{(n-1)} + bX_{1(n-1)} + c)Y_{(n)}$$

$$Y_{1(n)} = \frac{-(4aY + bX_{(n-1)} + bX_{1(n-1)} + c) + \sqrt{(4aY + bX_{(n-1)} + bX_{1(n-1)} + c)^2 - 8a(C(R)' - C(R))}}{4a} \quad (119)$$

$$C(R)'_{1(n)} = 2aY_{1(n)}^2 + (4aY + bX_{(n-1)} + bX_{1(n-1)} + c)Y_{1(n)} \quad (120)$$

$$C(R)_{(n)}'' = C(R)_{(n)}' + C(R)_{1(n)} \quad (121)$$

$$F(R)_n = C(R) - C(R)_n'' \quad (122)$$

$$X_{(n)} = \frac{-(bY_{(n)} + bY_{1(n)} + c) + \sqrt{(bY_{(n)} + bY_{1(n)} + c)^2 + 8aC(S)}}{4a} \quad (123)$$

$$C(S)'_{(n)} = 2aX_{(n)}^2 + (bY_{(n)} + bY_{1(n)} + c)X_{(n)} \quad (124)$$

$$X_{1(n)} = \frac{-(4aX + bY_{(n)} + bY_{1(n)} + c) + \sqrt{(4aX + bY_{(n)} + bY_{1(n)} + c)^2 - 8a(C(S)' - C(S))}}{4a} \quad (125)$$

$$C(S)'_{1(n)} = 2aX_{1(n)}^2 + (4aX + bY_{(n)} + bY_{1(n)} + c)X_{1(n)} \quad (126)$$

$$C(S)_{(n)}'' = C(S)_{(n)}' + C(S)_{1(n)} \quad (127)$$

$$F(S)_n = C(S) - C(S)_n'' \quad (128)$$

Mit Hilfe des hier grob umschriebenen Algorithmus kann gewährleistet werden, daß man Lösungen in ausreichend hoher Genauigkeit erhält. Die in einem Boden eingesetzte Anzahl an R- und S-Teilchen vor und nach der Rechnung bleiben konstant. Auch auf die gesamte Simulation bezogen, die wie schon erwähnt in den rechnerisch einfachsten Fällen die Berechnung von  $10^6$  Böden umfaßt, wird die korrekte Teilchenbilanz gewährleistet. Für das genannte Beispiel (siehe Seite 172) kann ein maximaler Fehler von  $1.6 \cdot 10^{-12} \cdot n_S$  1/l in den berechneten Konzentrationen des simulierten Chromatogramms abgeschätzt werden. ( $n_S$  : Aufgabemenge an S-Enantiomer) Die Rechenzeit reduzierte sich nach Optimierung des Algorithmus auf ein ertragbares Maß. Auf einem handelsüblichen, mit einem Pentium 100 MHz Prozessor ausgestatteten PC sind Berechnungen zu dem Beispiel je nach optischer Reinheit der Probe innerhalb von 5 bis 30 min abgeschlossen. Die Berechnung von Chromatogrammen,

denen 4000 Böden zugrunde liegen, dauern aber immer noch, je nach eingesetzter Aufgabemenge und vorgegebener optischer Reinheit der Probe, 30-240 min. Die eingangs in diesem Abschnitt aufgeführten Anforderungen an den Algorithmus sind hiermit vollkommen erfüllt.

Die in den vorhergehenden Kapiteln vorgestellten Simulationen beweisen die Zuverlässigkeit des Algorithmus, der alle vorgegebenen Parametersätze, insbesondere bei der Anpassung an die Referenzchromatogramme, anstandslos bewältigte. Mit diesem Algorithmus ist, ganz im Gegensatz zu dem eingangs erwähnten Programm von Jung und Schurig, hier nicht das Simulationsprogramm selber die zu bewältigende Herausforderung, sondern das Auffinden der richtigen Parameter bei der Simulation von experimentell gemessenen Chromatogrammen.

Die vorgestellte, problemspezifische Herleitung schließt nicht die Berechnung komplexerer Gleichgewichtssysteme mit diesem Algorithmus aus. Eine allgemeinere Formulierung des Iterationsschemas ermöglicht dann auch den Einsatz im Rahmen anderer Gleichgewichtsstudien.

## 6. Durchführung semiempirischer Rechnungen

Die hier vorgestellten semiempirischen Rechnungen wurden mit den Programmpaketen MOPAC 5 [80], MOPAC 6 [81], SCAMP [82] und VAMP [83] durchgeführt. Allen Rechnungen lagen die Programmoptionen PRECISE sowie im Falle der MOPAC-Programme NOMM zu Grunde.

Zur Geometrieoptimierung stehen den Programmen verschiedene Algorithmen zur Verfügung. Hier wurden die BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno)-Methode und der in den späteren Programmversionen (MOPAC 6, VAMP) enthaltene EF (Eigenvector Following )-Algorithmus verwendet. Leider erwies sich die BFGS-Methode als nicht sehr effektiv bei der Geometrieoptimierung der hier diskutierten Aggregate. In 50% aller Rechnungen, denen Aggregate mit über 60 Atomen zugrunde lagen, konnte kein Minimum gefunden werden. Die Rechnungen wurden mit der Meldung FURTHER WORK NOT JUSTIFIED abgebrochen. Mit der EF-Methode konnten die mit dem BFGS-Algorithmus abgebrochenen Geometrieoptimierungen erfolgreich abgeschlossen werden. Wurden jedoch im Rahmen der Geometrieoptimierung mit dem EF-Verfahren die leicht zugänglichen kartesischen Koordinaten verwendet, so waren die Meldungen des Programms widersprüchlich. Einerseits wurde eine gelungene Geometrieoptimierung bestätigt, andererseits erschien die undokumentierte Fehlermeldung NUMBER OF -VE-ROOTS WRONG. Mit Hilfe des Fortranquellcodes konnte diese Meldung als mißlungene Optimierung interpretiert werden. Durch die Verwendung von internen Koordinaten konnte dieses Problem behoben werden. Leider mußten dann aber auch für jede einzelne Rechnung individuell Z-Matrizen erstellt werden. Auf eine Überprüfung der Schwingungsmoden (Kraftkonstanten) zur Charakterisierung der gefundenen Minimumsgeometrien wurde wegen der Größe der berechneten Aggregate verzichtet.

Das MNDO-M-Verfahren wurde lediglich in das MOPAC 5 Programmpaket implementiert. Deshalb waren mit ihm nur Geometrieoptimierungen mit der BFGS-Methode möglich. Alle anderen hier vorgestellten, semiempirischen Geometrieoptimierungen verwendeten den EF-Algorithmus sowie interne Koordinaten.

Zur Berechnung der Aggregatsminimumsgeometrien wurden dem jeweiligen Wechselwirkungsmuster entsprechend jeweils zwei verschiedene Startgeometrien vorgegeben. In der einen Variante wurde von einem relativ großen Abstand (4 Å) der Wechselwirkungsorte zur Aggregatbildung ausgegangen. Der anderen Startgeometrie lagen relativ kleine Abstände (2 Å) der beabsichtigten Wechselwirkungsstellen zugrunde. (Es mußte dann die Programmoption GEO-OK verwendet werden.) Im Gegensatz zu den Erfahrungen anderer Autoren [37] erwies sich die zweite Herangehensweise fast immer als die erfolgreichere, vorausgesetzt man verwendete interne Koordinaten.

## 7. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde für die Enantiomerenüberschußabtrennung an achiralen Phasen zum ersten Mal ein theoretisch fundiertes Modell vorgestellt, das auch durch experimentelle Daten verifiziert werden kann. Im Gegensatz zu den in der Literatur vertretenen Ansichten, die auf rein spekulativen bzw. vage formulierten Konzepten beruhen, wurde hier ein exakt definiertes Modell entwickelt, mit dem die Enantiomerenüberschußabtrennung qualitativ und quantitativ erklärt werden kann. Die Ergebnisse verdeutlichen, daß aus den Chromatogrammen in Zusammenarbeit mit semiempirischen Methoden die Energien und Geometrien der für die Enantiomerenüberschußabtrennung verantwortlichen homochiralen und heterochiralen Dimere bestimmt werden können.

Auf der Grundlage des theoretischen Bodenmodells konnte der Trennprozeß durch ein komplexes System von Gleichgewichtsreaktionen beschrieben werden, das die reversible Bildung von homo- und heterochiralen Dimeren sowohl in der mobilen als auch in der stationären Phase umfaßt. In diesem Modell sind nur 5 der insgesamt 7 Gleichgewichtskonstanten frei wählbar. Das aus dem Gleichungssystem resultierende Polynom 4. Grades wurde mit einem eigens von mir ausgearbeiteten Algorithmus gelöst, der auch die Simulation von Chromatogrammen der Enantiomerenüberschußabtrennung ermöglicht. Mit Hilfe von Chromatogrammsimulationen wurden die verschiedenen möglichen Erscheinungsbilder der Enantiomerenüberschußabtrennung hinsichtlich der Chromatogrammform und des Trennverhaltens klassifiziert und systematisiert. Unter anderem konnte hierbei das von Gil Av postulierte Modell der chiralen Vorbelegung, das eine ausschließliche Dimerisierung in der stationären Phase fordert, widerlegt werden. Desweiteren wurde im Rahmen dieser Testsimulationen nachgewiesen, daß die Qualität der Trennung hauptsächlich durch die Stabilität der homochiralen Dimere bestimmt wird. In Abhängigkeit vom chromatographischen System (Bodenzahl, Totzeit u.s.w.) ist die Enantiomerenüberschußabtrennung nur in einem bestimmten Fenster der Dimerisierungsenergien beobachtbar, so dürfen für die in dieser Arbeit untersuchten Trennungen die Assoziierungsenergien nur zwischen -2 bis -10 kcal/mol liegen. Bei höheren oder niedrigeren Wechselwirkungsenergien ist bei den hier gewählten Bedingungen prinzipiell keine Enantiomerenüberschußabtrennung möglich. Durch den Wechsel zu einem anderem Fließmittel können aber höhere oder niedrigere Dimerkonzentrationen leicht erzeugt werden. Die relativen Stabilitäten der homochiralen und heterochiralen Assoziate zueinander sind für die Trennung von untergeordneter Bedeutung. Insbesondere ist der Befund zu betonen, daß Enantiomerenüberschußabtrennungen auch bei gleicher Stabilität der homochiralen und heterochiralen Dimere beobachtet werden können. In der Literatur wurden dagegen bisher für das Zustandekommen einer Enantiomerenüberschußabtrennung unabdingbar unterschiedliche Stabilitäten der diastereomeren Assoziate gefordert, fernerhin

wurde eine Steigerung der Trennleistung durch Erhöhung der Dimerisierungsenergie erwartet. Die aufgeführten Simulationen zeigen, daß letztendlich die Enantiomerenüberschußabtrennung lediglich auf Konzentrationseffekte, die durch die Dimerenbildung verursacht werden, zurückzuführen ist. Die aus diesen Testrechnungen gewonnenen Erkenntnisse unterscheiden sich somit drastisch von den bisherigen Vorstellungen zur Enantiomerenüberschußabtrennung.

Zur Simulation der experimentellen Chromatogramme wurden die dem jeweiligen Trennproblem zugrunde liegenden Gleichgewichtskonstanten mit Hilfe des Simulationsprogrammes bestimmt. Hierzu wurden lediglich die gemessenen Chromatogramme von zwei Aufgaben herangezogen, nämlich die einer reinen Enantiomer- und einer Racemataufgabe. Alle anderen Simulationen von experimentellen Chromatogrammen, auch die der eigentlichen Enantiomerenüberschußabtrennungen nichtracemischen Mischungen des gesamten Aufgabemengenbereichs, wurden mit dem so bestimmten Parametersatz (Gleichgewichtskonstanten) berechnet. Die exzellente Übereinstimmung der experimentellen und berechneten Chromatogramme bestätigen einerseits das entwickelte Modell der Enantiomerenüberschußabtrennung und andererseits die zur Simulation eingesetzten Parameter. Die Reproduzierbarkeit der gemessenen Chromatogramme erstreckt sich über den gesamten Bereich der experimentell zugänglichen Aufgabemengen unterschiedlichster nichtracemischer bzw. racemischer und enantiomerenreiner Proben. Somit können zukünftig auch Dimerisierungsenergien von nicht chiralen Substanzen, ausgehend von einem einzigen Chromatogramm, berechnet werden.

Die aus den Chromatogrammsimulationen erhaltenen Dimerisierungsgleichgewichtskonstanten und Kapazitätsfaktoren ermöglichen den Vergleich mit den Bildungsenthalpien der entsprechenden Assoziate aus quantenchemischen Rechnungen; das heißt: mit dieser Methode können Kraftfeld- und quantenchemische Verfahren auf ihre Anwendbarkeit zur Berechnung intermolekularer Wechselwirkungen überprüft werden.

Nicht jedes Kraftfeld- oder semiempirische Verfahren ist zur Wiedergabe intermolekularer Wechselwirkungen geeignet. Deshalb mußten umfangreiche Testrechnungen durchgeführt werden. Bedauerlicherweise können die Kraftfeldverfahren intermolekulare Wechselwirkungen nicht angemessen wiedergeben. Sie berechnen die intermolekularen Wechselwirkungsenergien, insbesondere die der Wasserstoffbrückenbindungen und die  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen, allgemein zu hoch. Desweiteren weisen sie bisweilen diverse unverständliche Artefakte auf, die ihren Einsatz stark einschränken. Deshalb wurden in dieser Arbeit die Ergebnisse aus Kraftfeldrechnungen nur ansatzweise berücksichtigt.

Unter den semiempirischen Methoden konnte nur das AM1-Verfahren die intermolekularen Wechselwirkungen akzeptabel wiedergeben. Insbesondere das PM3-Verfahren zeigte im Rahmen der Testrechnungen zu große Schwächen. So ermittelte es bei der Berechnung von Wasserstoffbrückenbindungen bedeutend zu niedrige Wechselwirkungsenergien und führte zusätzlich zu einem absolut falschen abstandsabhängigen Verhalten. Auch bei den anderen Wechselwirkungstypen traten mit dem PM3-Verfahren Probleme auf. Zum Beispiel werden die

Benzol-Alkan Wechselwirkungen mit -5 kcal/mol als zu stabil berechnet. Nach dem PM3-Verfahren würden sie demnach stärker als die  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen im Benzol-Dimer und sogar doppelt so groß wie die mancher Wasserstoffbrückenbindungen sein. Als dritte semiempirische Methode wurde das MNDO/M-Verfahren getestet. Bei großen Bindungslängen der Wasserstoffbrücken berechnet es aber leider zu große Wechselwirkungsenergien und ist deshalb auch nicht zur Berechnung der Dimerisierungsenergien und Kapazitätsfaktoren geeignet.

Mit dem AM1-Verfahren können die aus den Chromatogrammsimulationen sich ergebenden Dimerisierungsenergien fast quantitativ reproduziert werden, während die berechneten Kapazitätsfaktoren, die die Phasenübergänge beschreiben, zumindest qualitativ richtig wiedergegeben werden. Für die untersuchten Enantiomerenüberschußabtrennungen der einzelnen Substanzen können somit auch die die Trennung bewirkenden Aggregate berechnet werden.

Für die Enantiomerenüberschußabtrennung des Binaphthols deuten die AM1-Rechnungen darauf hin, daß Assoziate durch Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den jeweiligen Monomeren gebildet werden, die durch Wasserstoffbrückenbindungen stabilisiert werden. Bedingt durch die unterschiedliche Anzahl der ausgebildeten Wasserstoffbrückenbindungen, unterscheiden sich die homochiralen und heterochiralen Dimerstabilitäten. Dieser Befund steht im Einklang mit den aus Chromatogrammsimulationen erhaltenen Dimerstabilitäten.

Dagegen folgt aus den AM1-Rechnungen für die Trennung des Dimethoxy-Binaphthyls, daß die geforderten Assoziate auf Grund von Dipol-Dipol-Wechselwirkungen gebildet werden. Den Rechnungen zufolge reichen diese Wechselwirkungen vollkommen aus, um wie bei den experimentell erhaltenen Chromatogrammen Enantiomerenüberschußabtrennungen herbeizuführen. Mögliche  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen besitzen nur eine untergeordnete Bedeutung.

Die unterschiedlichen Selbstkomplexierungen der einzelnen Aminosäureester, die sich aus den AM1-Rechnungen und den Chromatogrammsimulationen ergeben, sind nicht auf die Größen der Aminosäurereste, der Alkoholkomponente der Esterfunktion und der Säurekomponente der Amidfunktion zurückzuführen, sondern beruhen nur auf der optimalen Ausbildung von Wasserstoffbrücken und der hierdurch hervorgerufenen Konformationsänderungen.

Im Rahmen der Enantiomerenüberschußabtrennung der untersuchten Arylcarbinole ist die Größe des Arylsubstituenten für die beobachteten Unterschiede in den Dimerisierungsenergien verantwortlich. Mit den AM1-Rechnungen können auch hier die mit Hilfe der Chromatogrammsimulationen berechneten Dimerstabilitäten nachvollzogen werden.

Die abschließend untersuchte Enantiomerenüberschußabtrennung der Trögerschen Base ist vom theoretischen Standpunkt her das interessanteste Problem. Denn es wurde, obwohl die Trögersche Base offensichtlich keine Wechselwirkungsstellen für eine Dimerisierung aufweist, trotzdem durch die Simulationen der Chromatogramme eine Aggregatsbildungsenergie von -5 kcal/mol für die beiden diastereomeren Komplexe ermittelt. Eine vergleichbare Wechsel-



wirkungsenergie von  $-4.88$  kcal/mol konnte mit dem AM1-Verfahren für Trimere berechnet werden, in denen ein Wassermolekül eine Wechselwirkung zwischen zwei Molekülen der Trögerschen Basen vermittelt. Dieses Modell für die Enantiomerenüberschußabtrennung der Trögerschen Base wird auch durch die extremen Schwankungen der Retentionszeiten in den experimentellen Chromatogrammen und durch Untersuchungen zur Sättigung des chromatographischen Systems mit Wasser unterstützt. Dieser Befund steht ganz im Einklang mit dem Modell zur Enantiomerenüberschußabtrennung, die wie schon erwähnt nur auf Konzentrations-effekte zurückzuführen ist. Dieses Beispiel verdeutlicht in fast einzigartiger Weise, daß durch den Synergieeffekt von Chromatogrammsimulationen und semiempirischen Verfahren sinnvolle Mechanismen zur Erklärung von Enantiomerenüberschußabtrennungen entwickelt werden können.

Die aufgeführten Anwendungen haben bewiesen, daß sich das theoretische Modell zur Erklärung der Enantiomerenüberschußabtrennung mit Hilfe der reversiblen Bildung von Dimerkomplexen in der stationären und mobilen Phase bewährt hat. Die mit dem Modell erhaltenen Energien konnten durch AM1-Rechnungen überprüft und bestätigt werden. Fernerhin können zukünftig mit den semiempirischen Methoden die Dimerisierungsenergien noch nicht chromatographisch untersuchter enantiomerer Verbindungen errechnet werden und Voraussagen gemacht werden, ob sich durch die Chromatographie an achiralen Phasen nicht-racemische Gemische trennen lassen. Somit hätte sich die eher zufällig beobachtete Enantiomerenüberschußabtrennung zu einer Trennmethode entwickelt, die gezielt für spezifische Trennprobleme eingesetzt werden kann.

## **Anhang A : Graphische Gegenüberstellung experimenteller und simulierter Chromatogramme**

Legende zu den Chromatogrammsimulationen

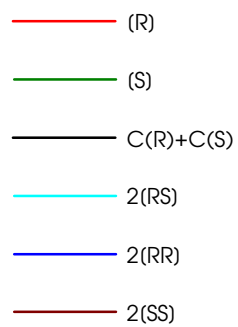
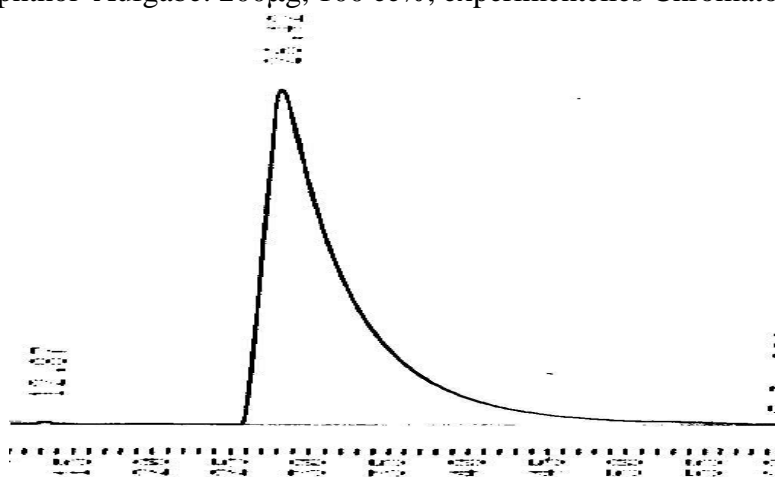
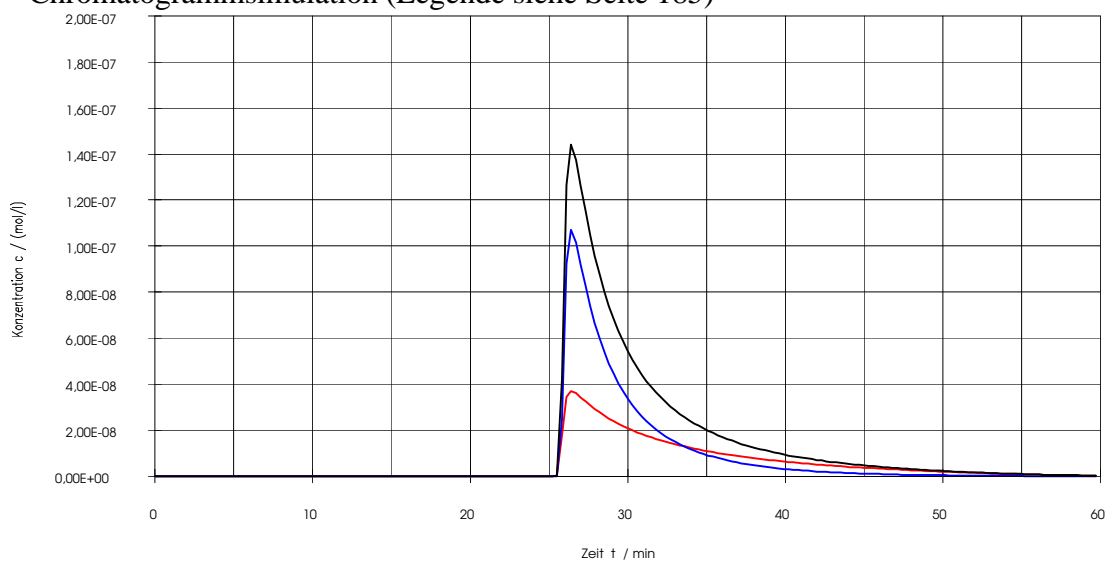


Abb. A1 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 200 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

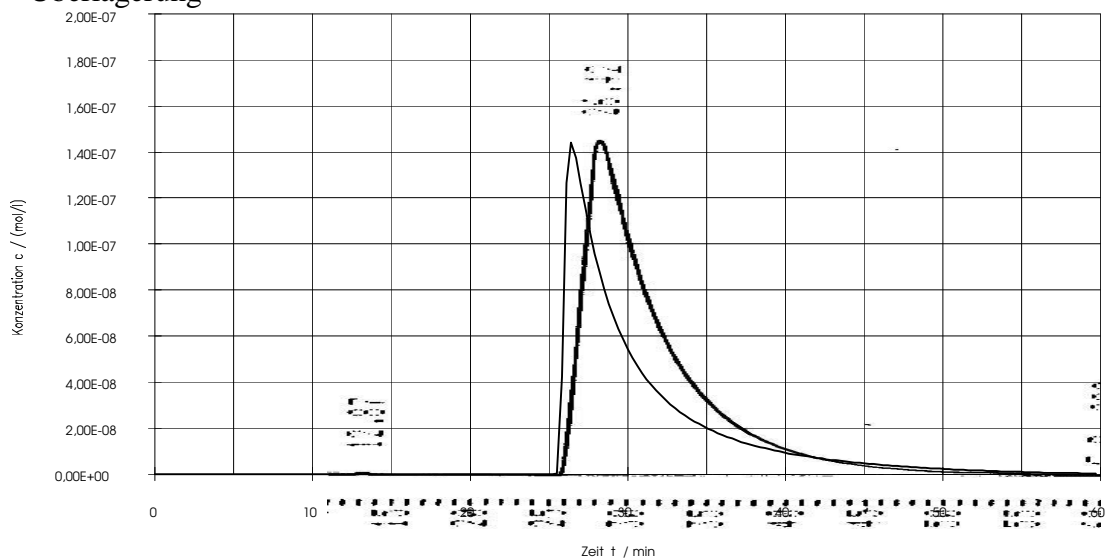
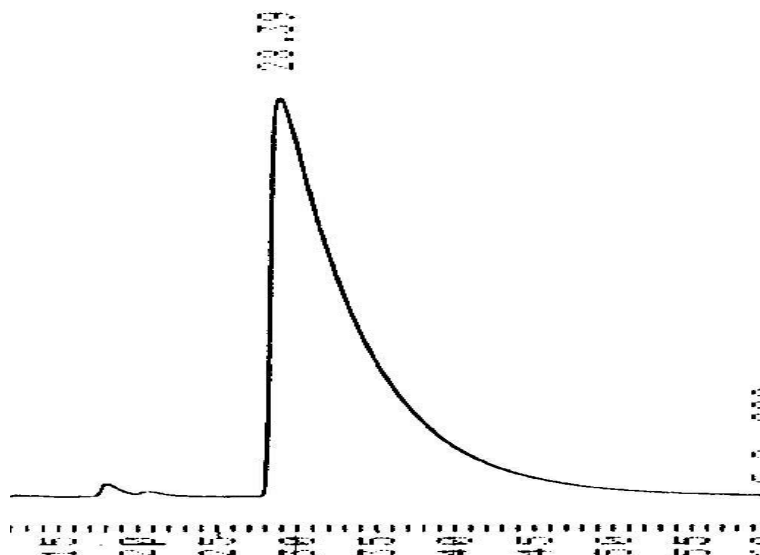
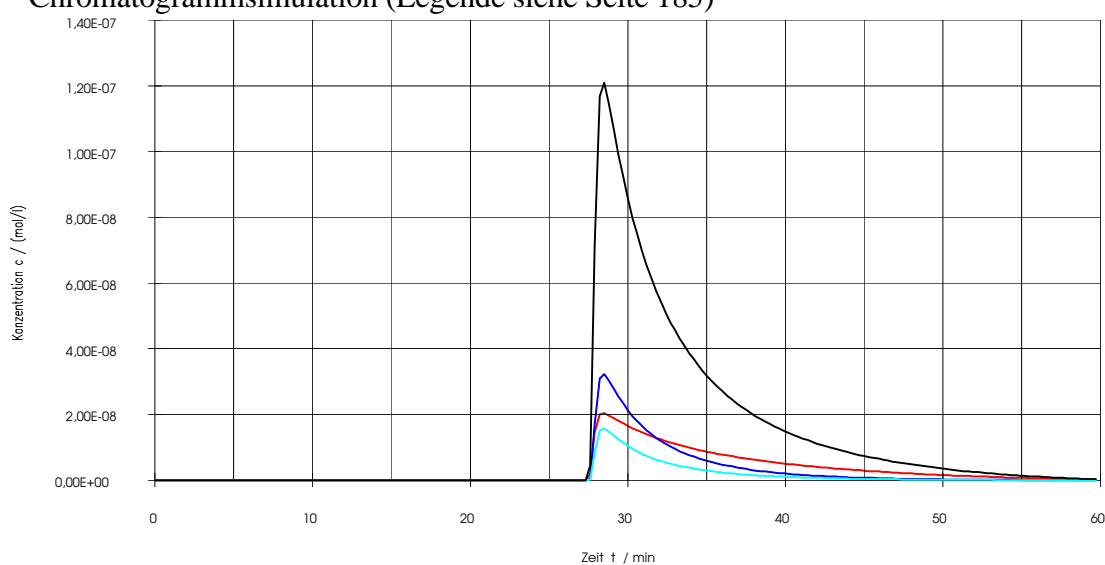


Abb. A2 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 200 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

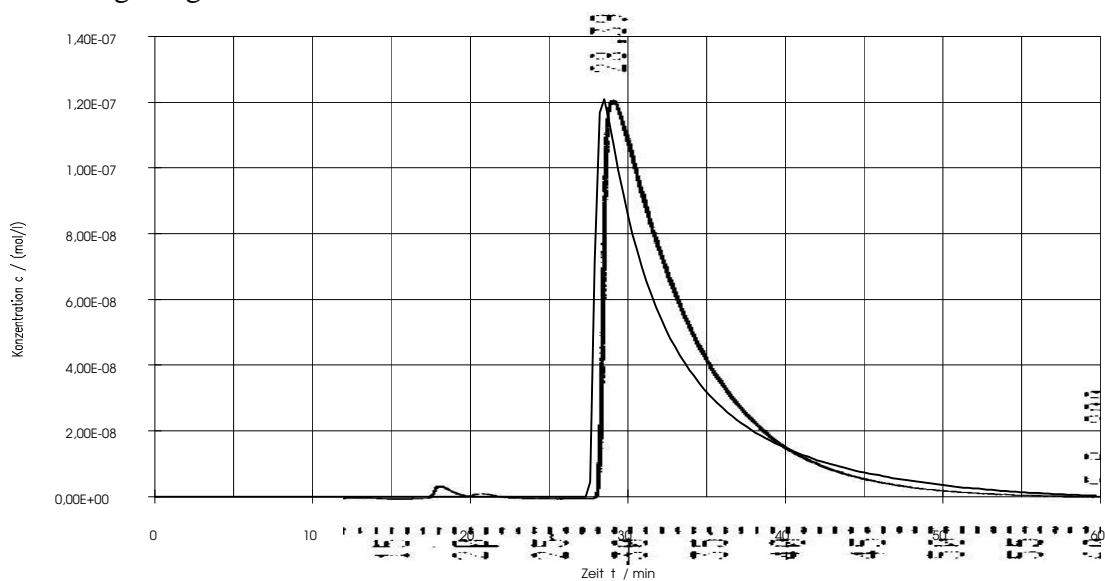
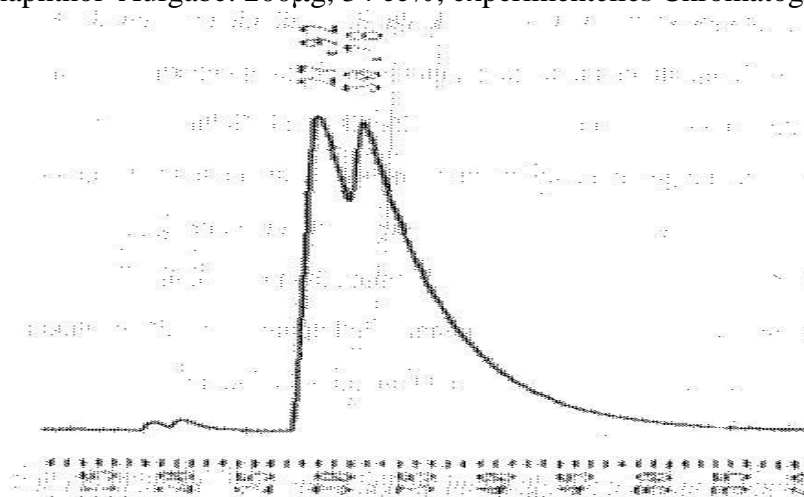
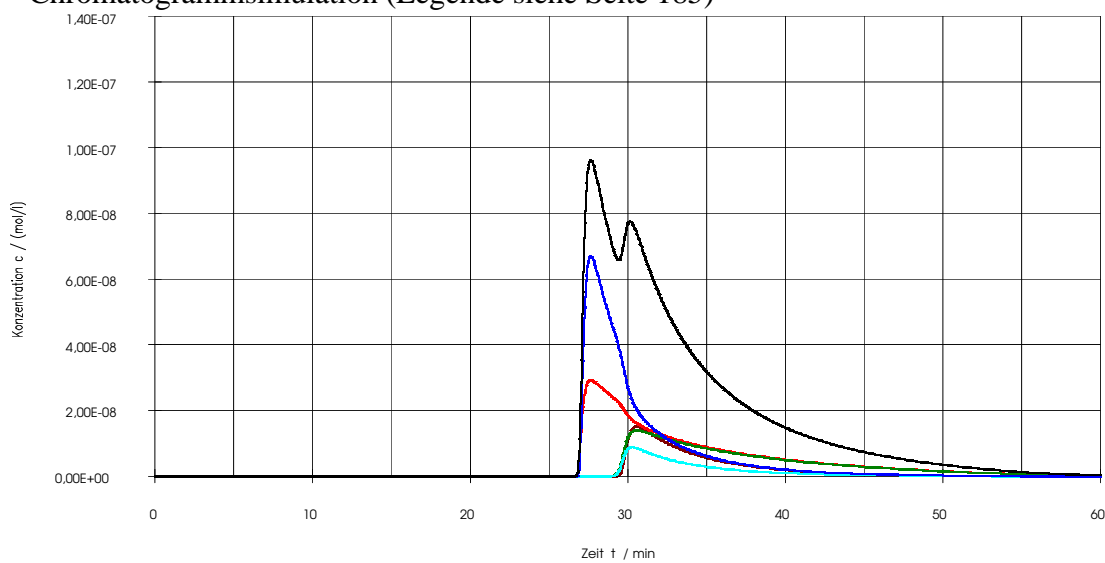


Abb. A3 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 200 $\mu$ g, 34 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

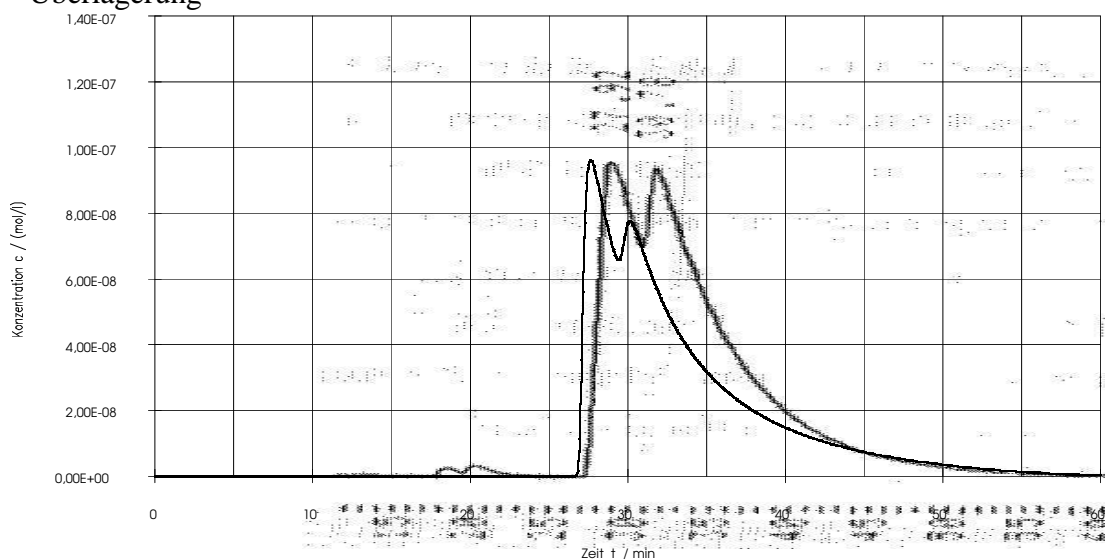
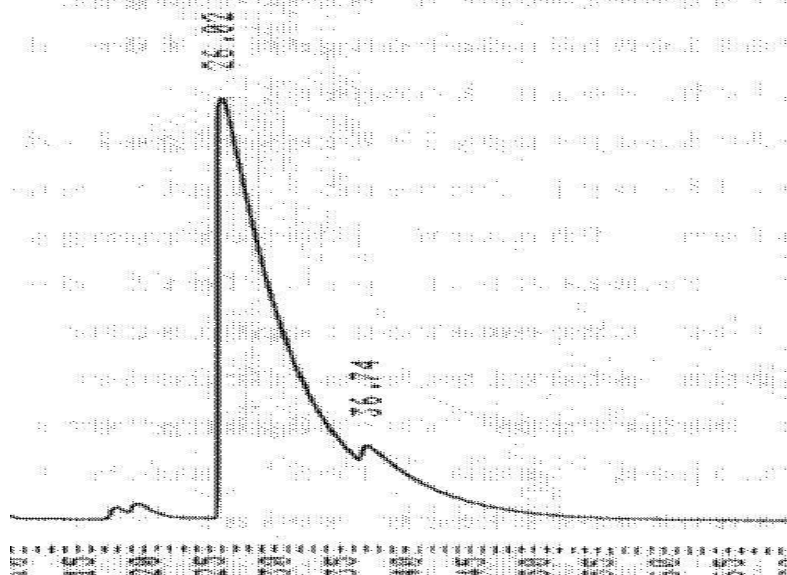
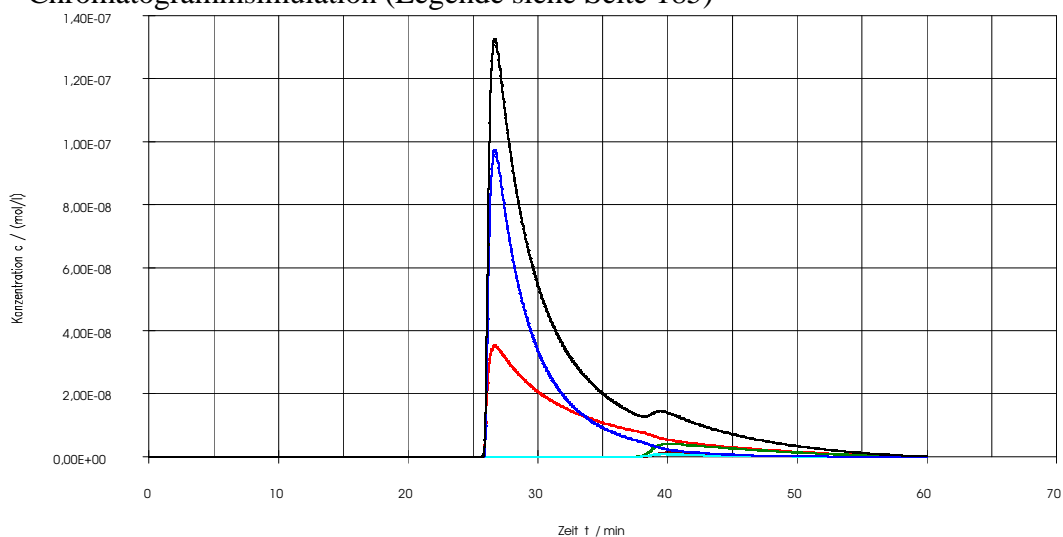


Abb. A4 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 200 $\mu$ g, 86 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

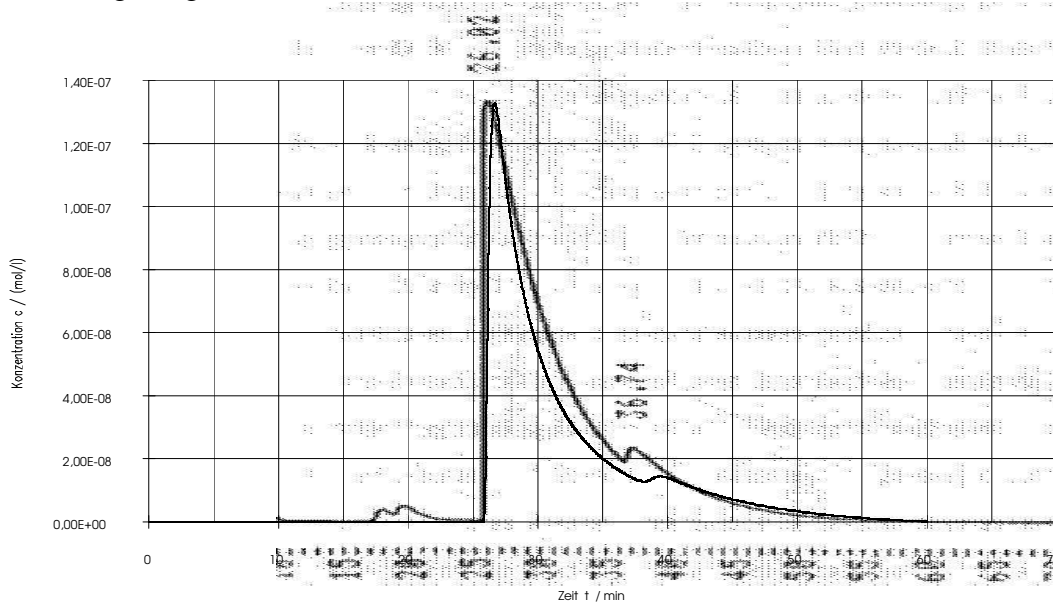
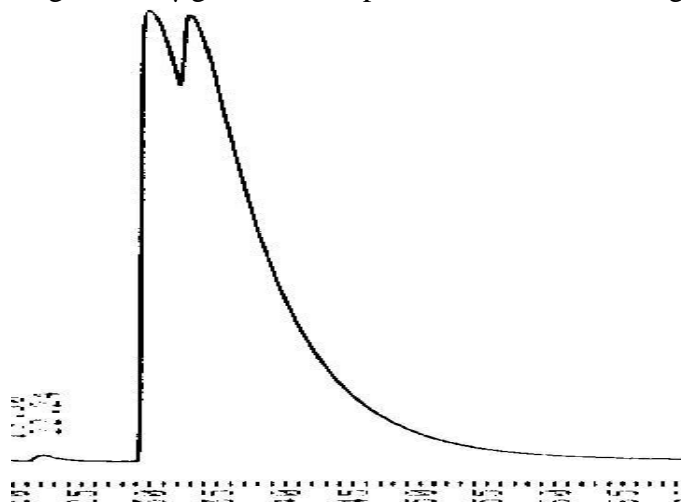
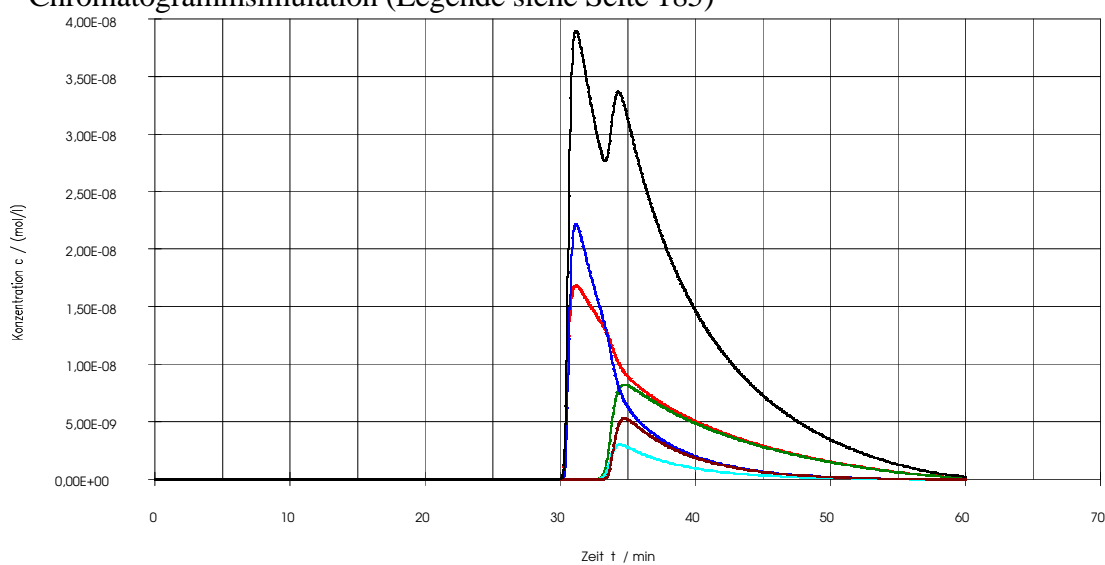


Abb. A5 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 33 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

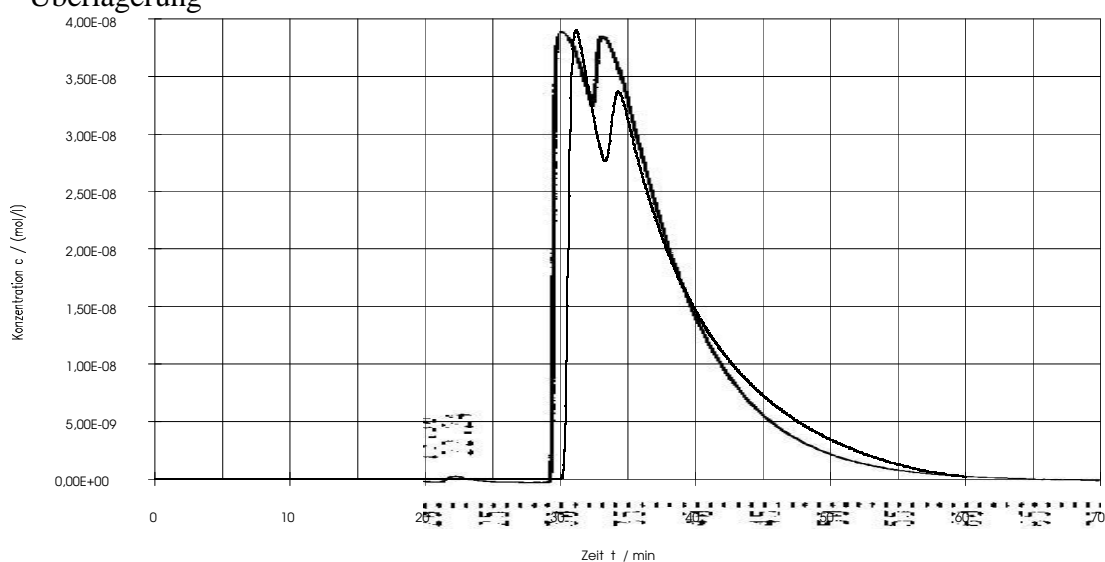
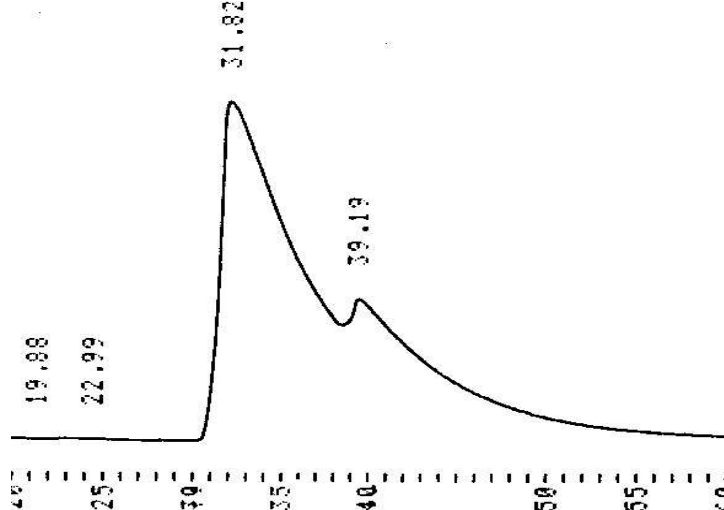
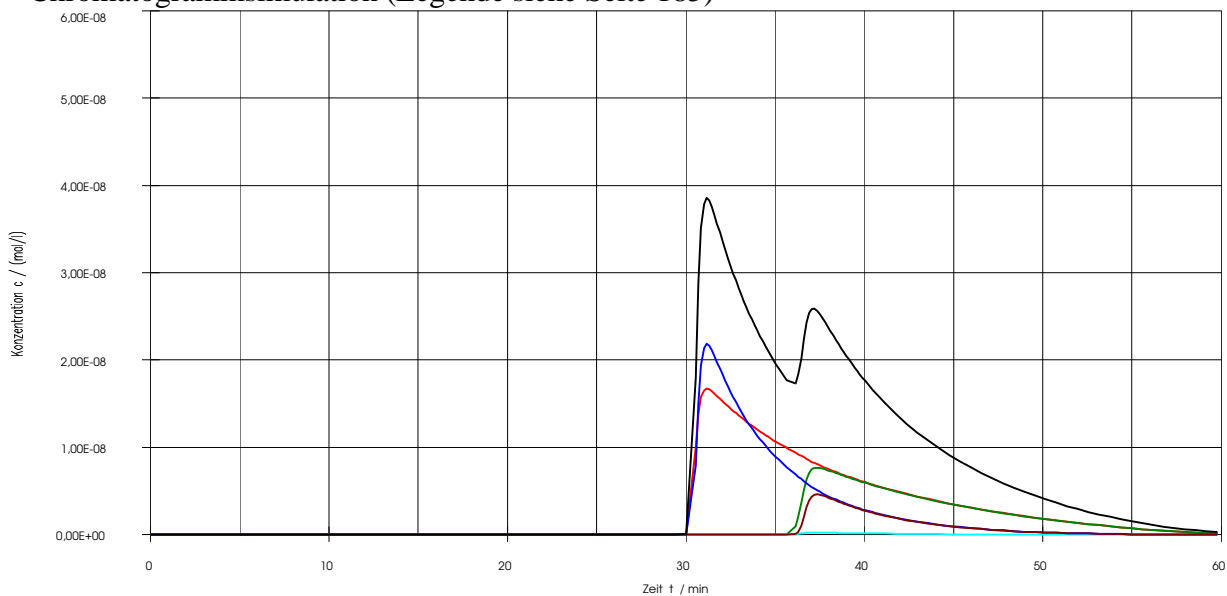


Abb. A6 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 46 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

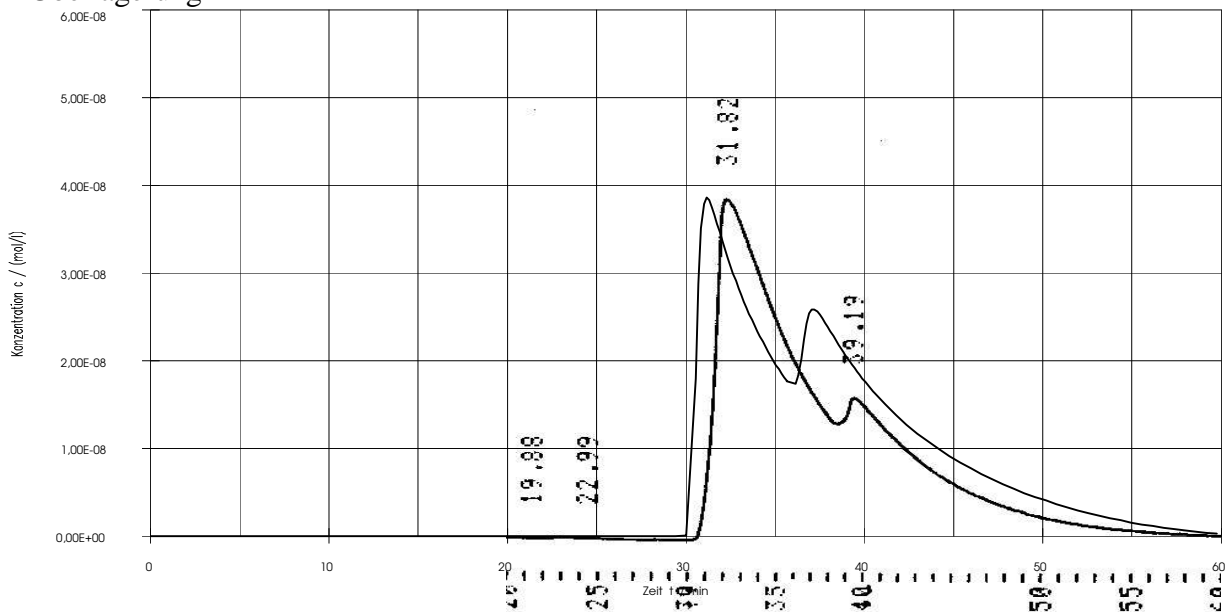
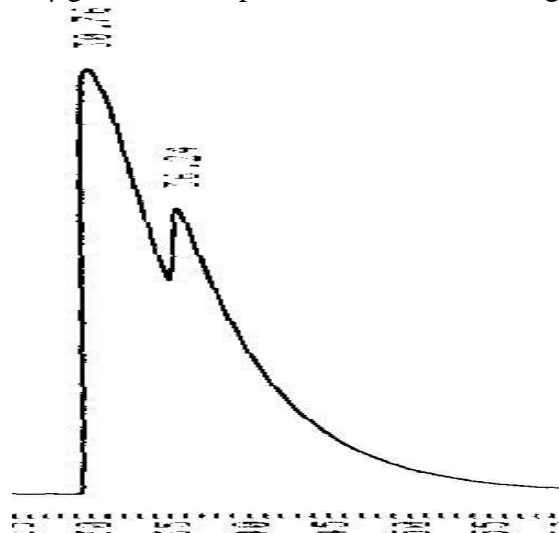
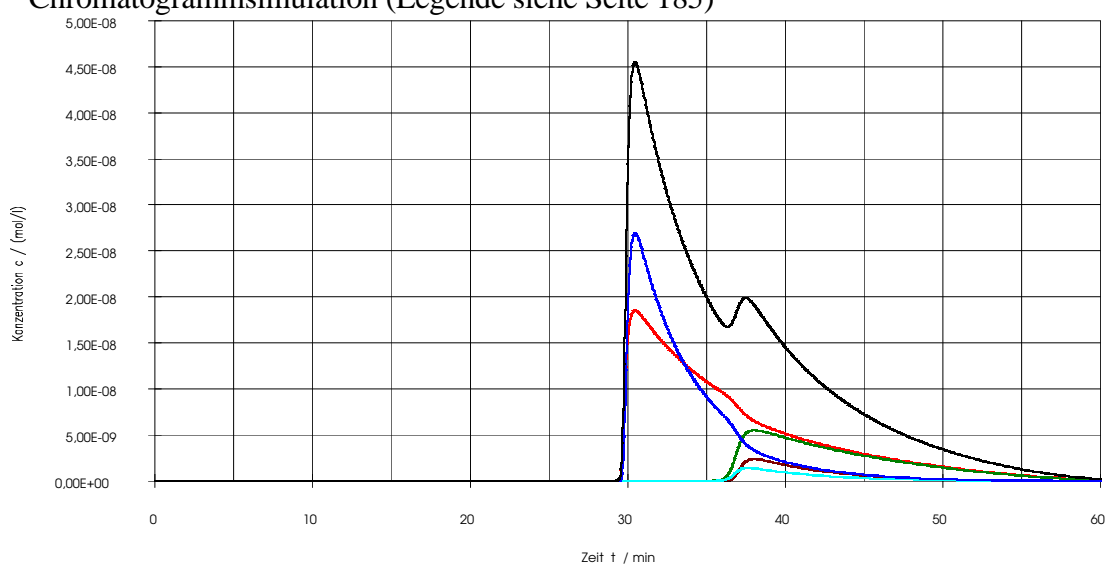




Abb. A7 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

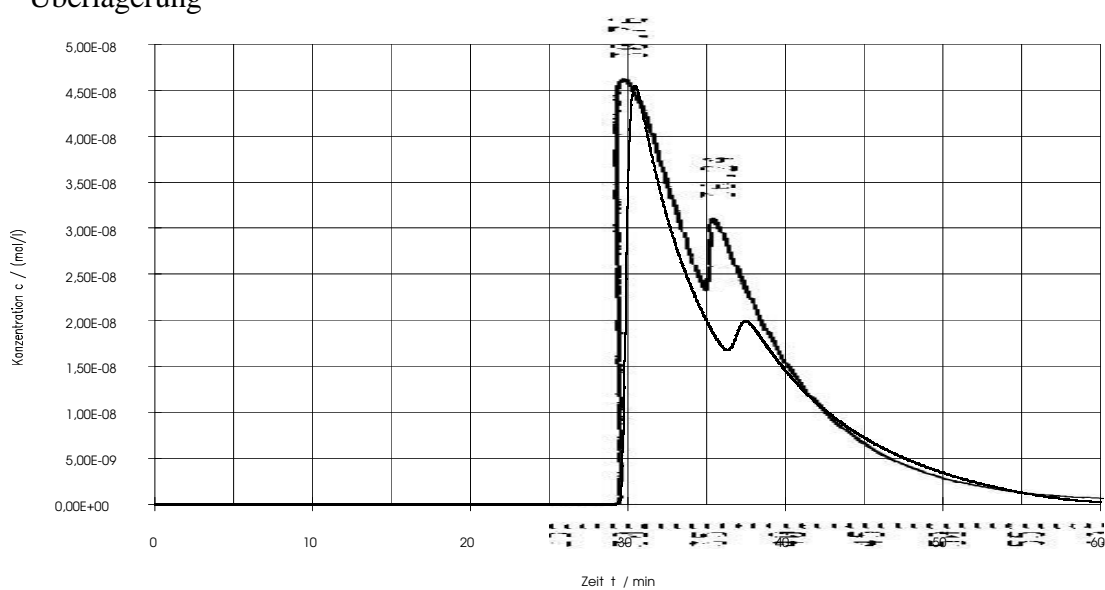
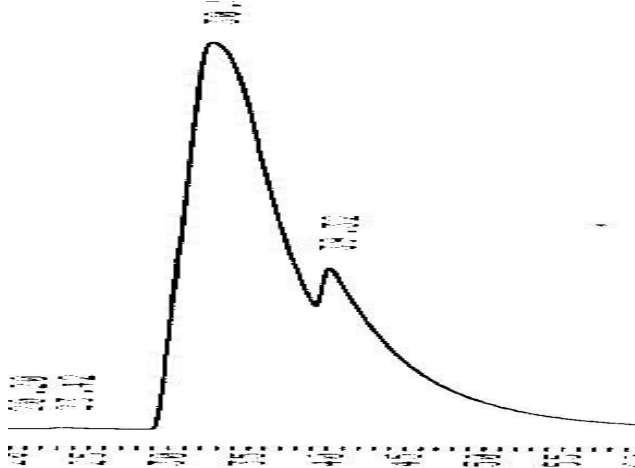
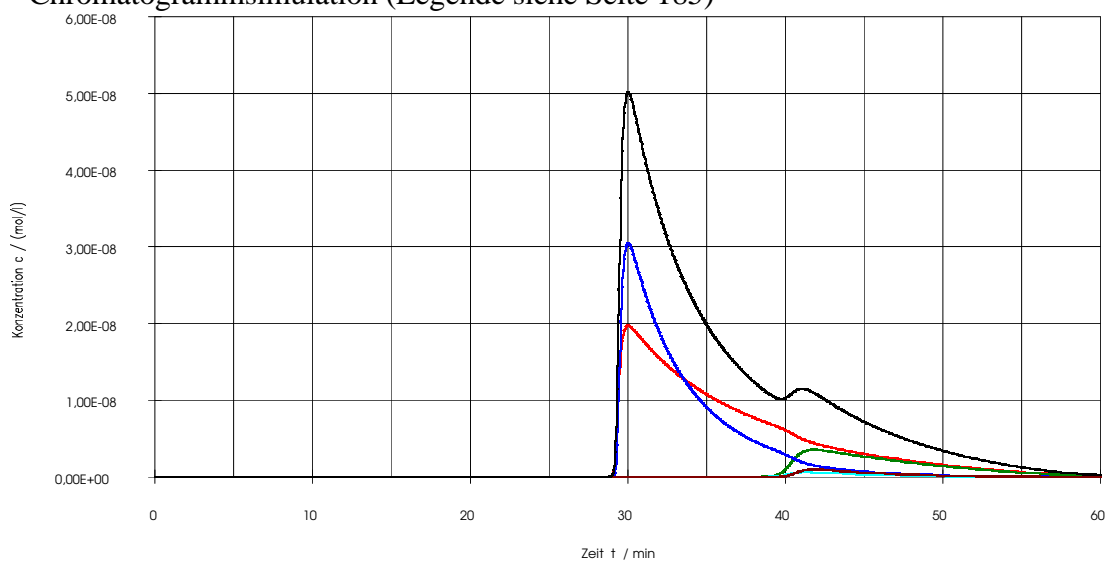


Abb. A8 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 78 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

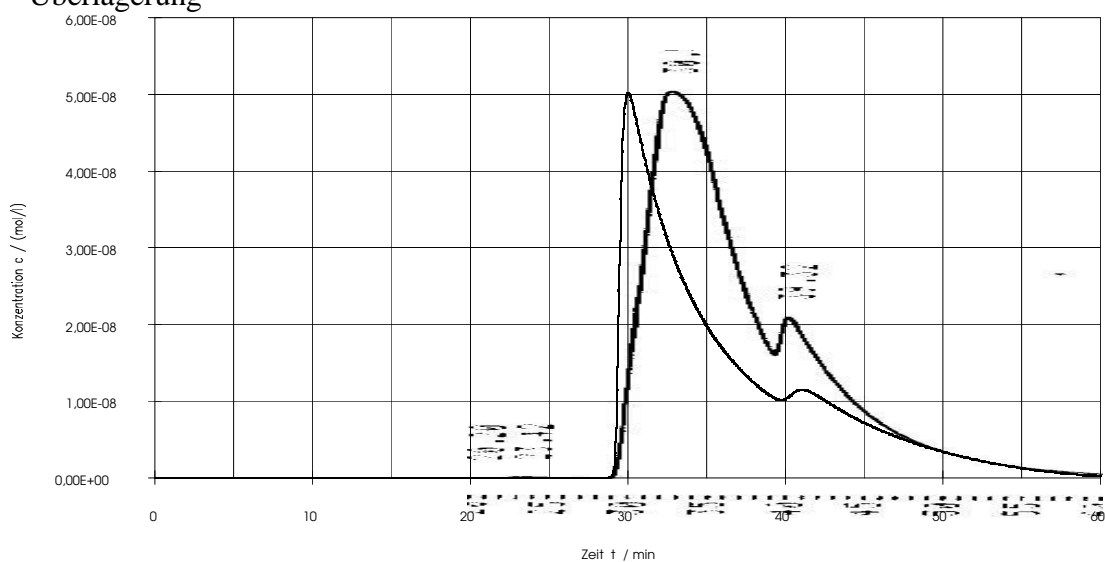
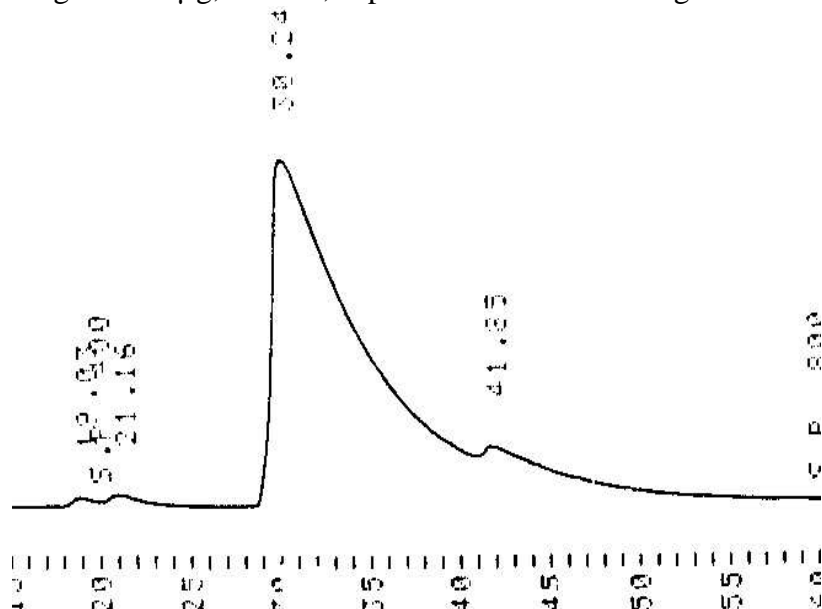
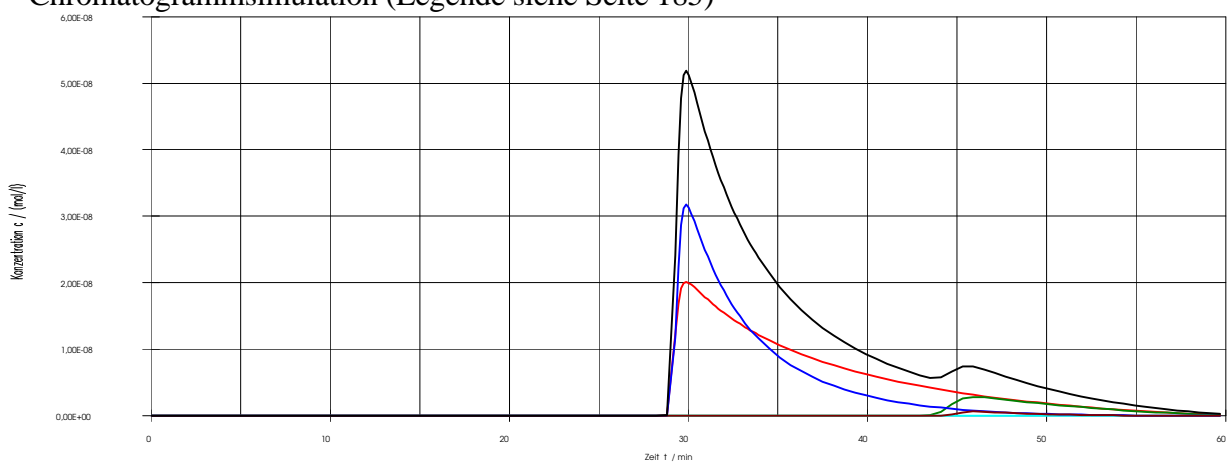


Abb. A9 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 86 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

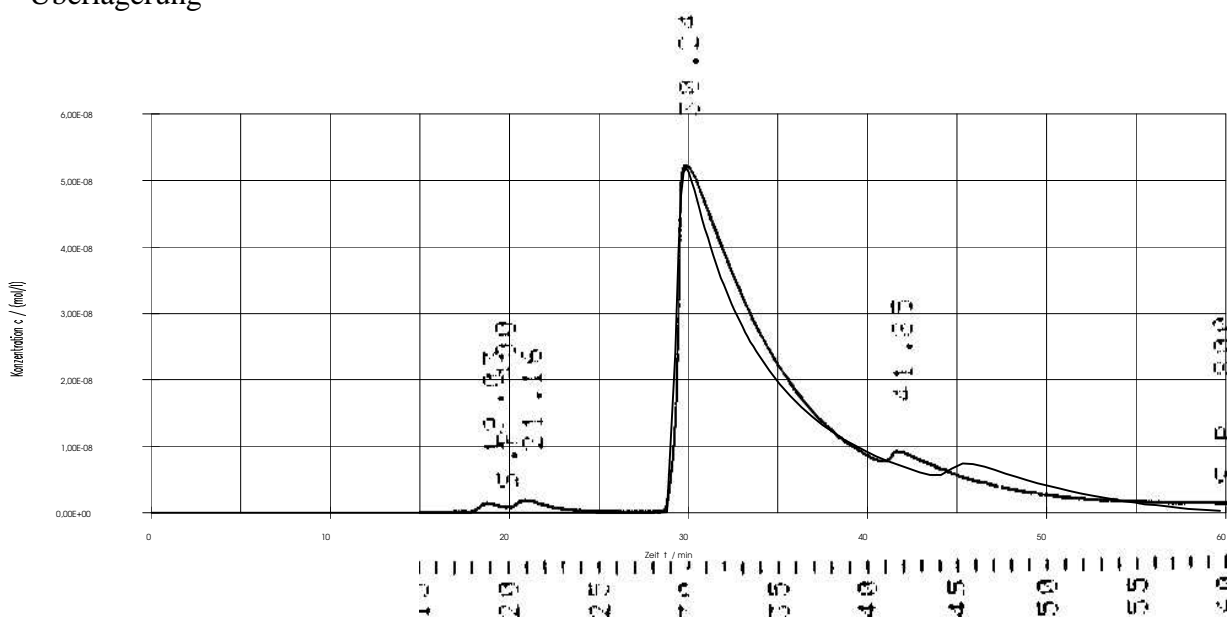
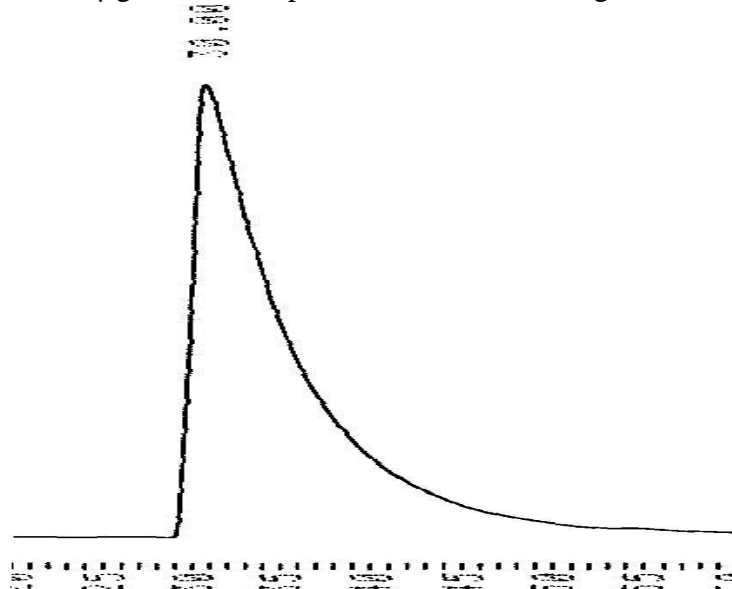
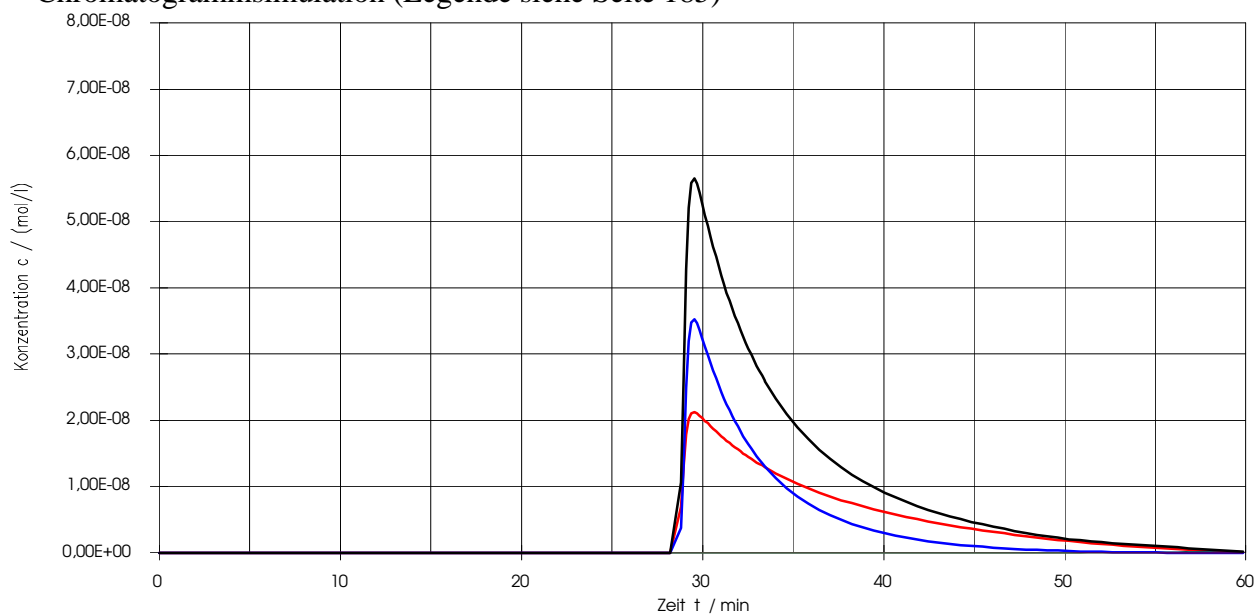


Abb. A10 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 99 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [5]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

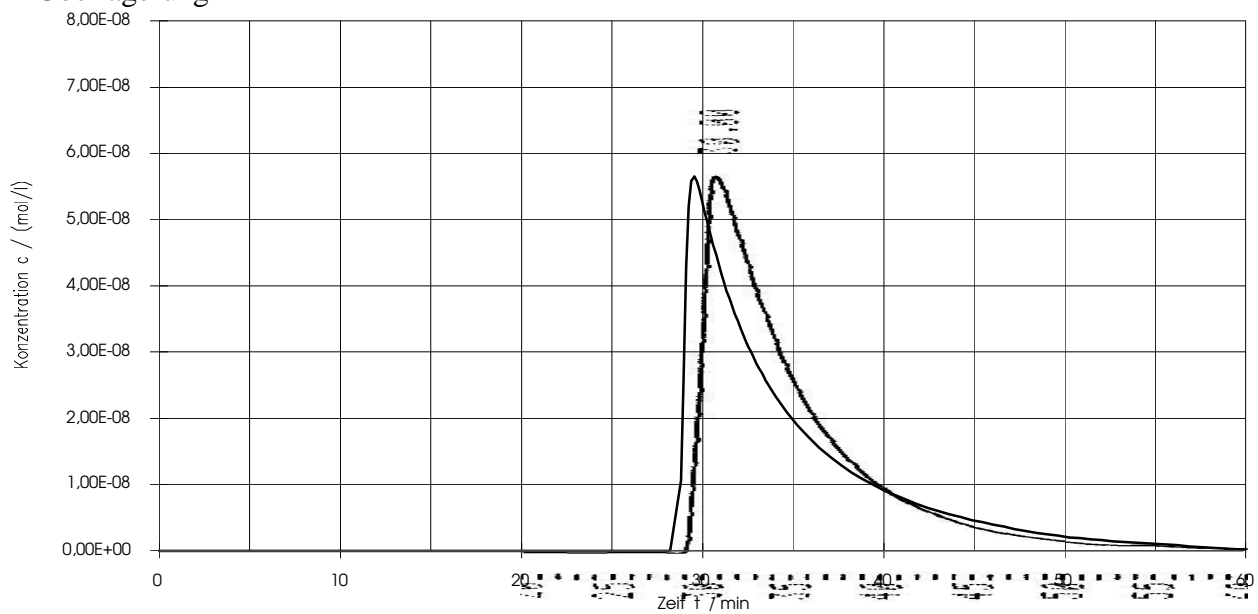
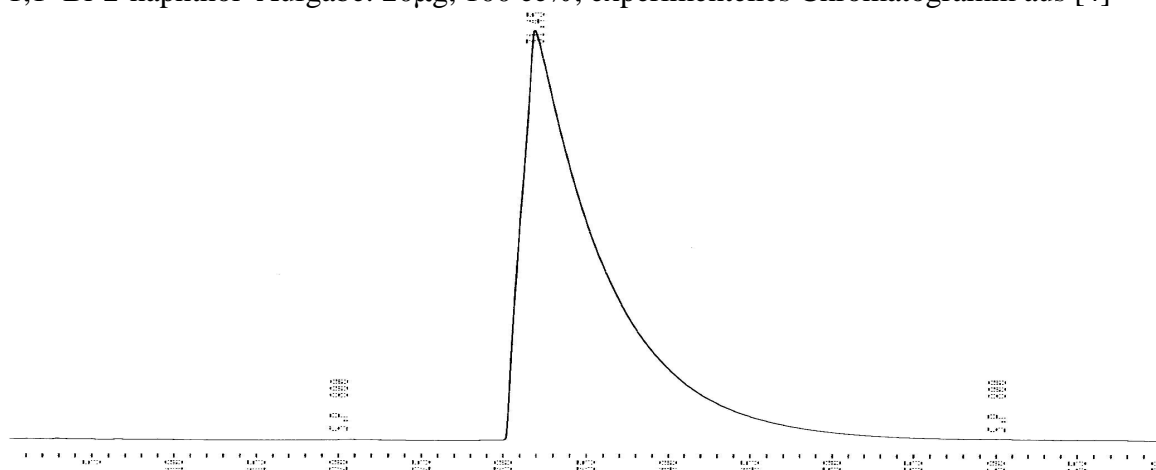
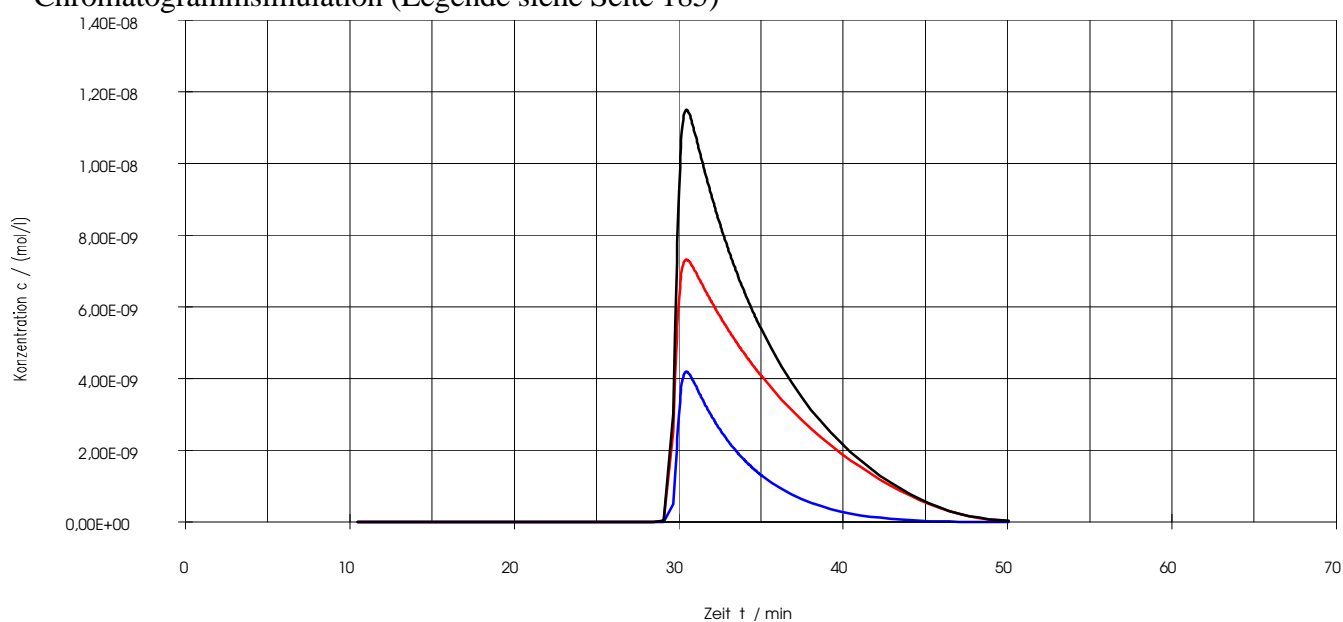


Abb. A11 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

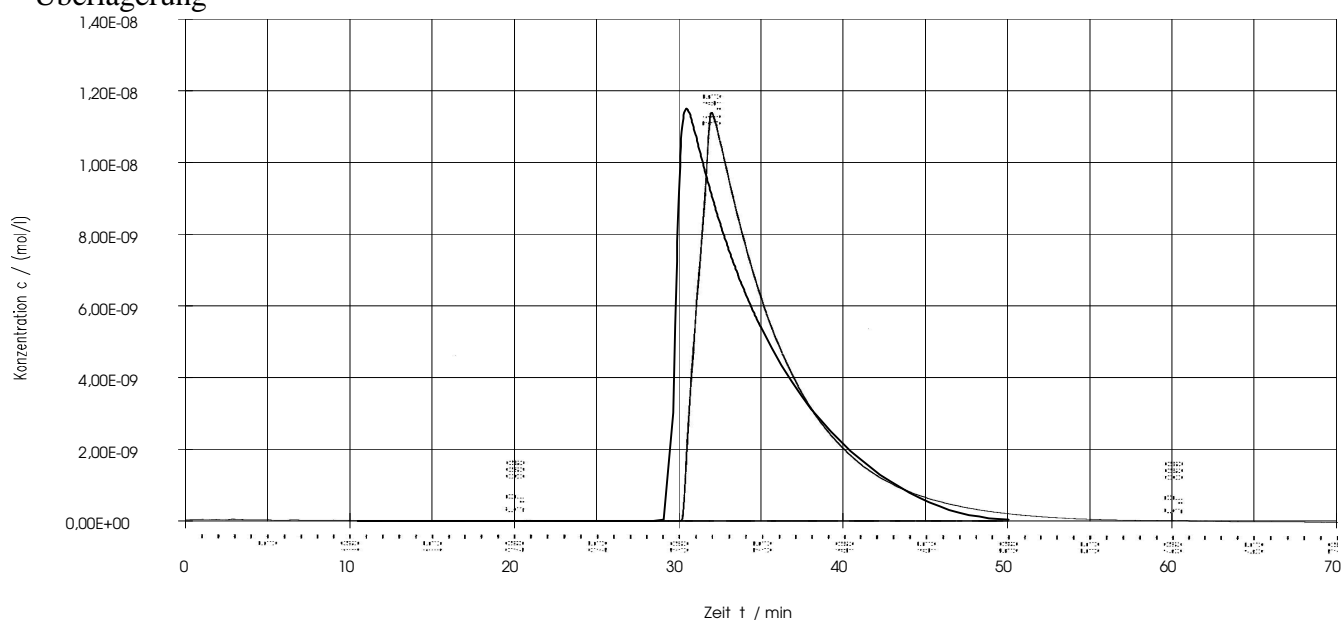
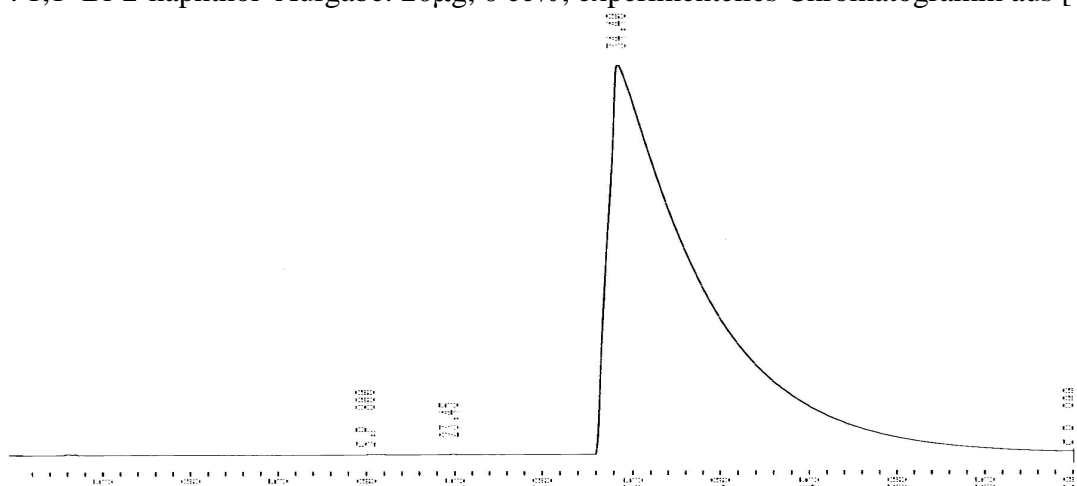
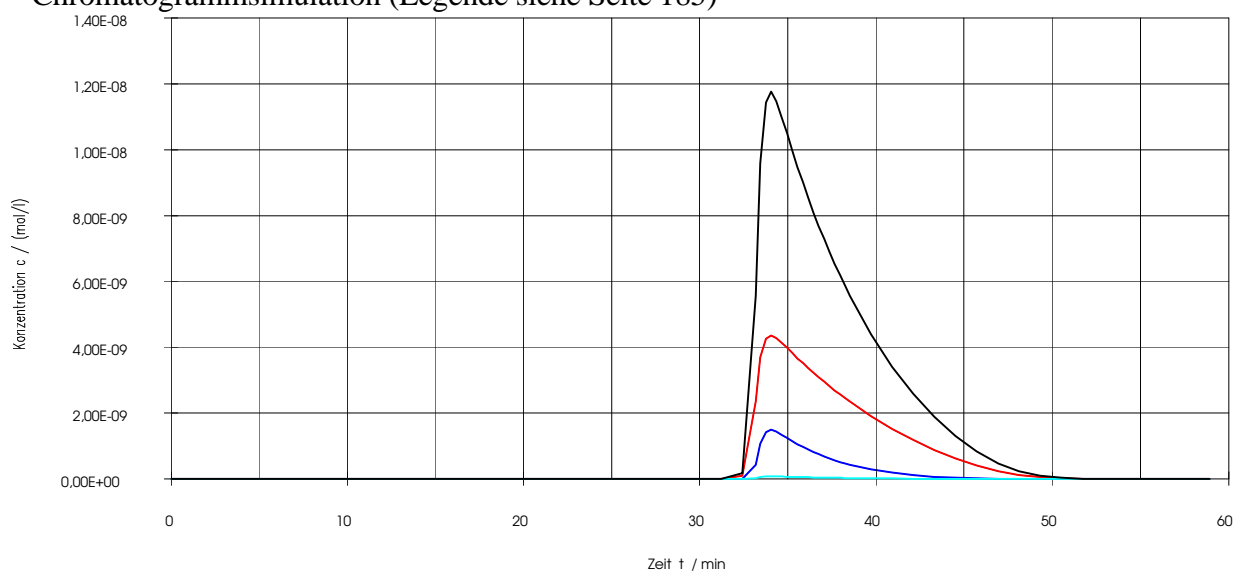


Abb. A12 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

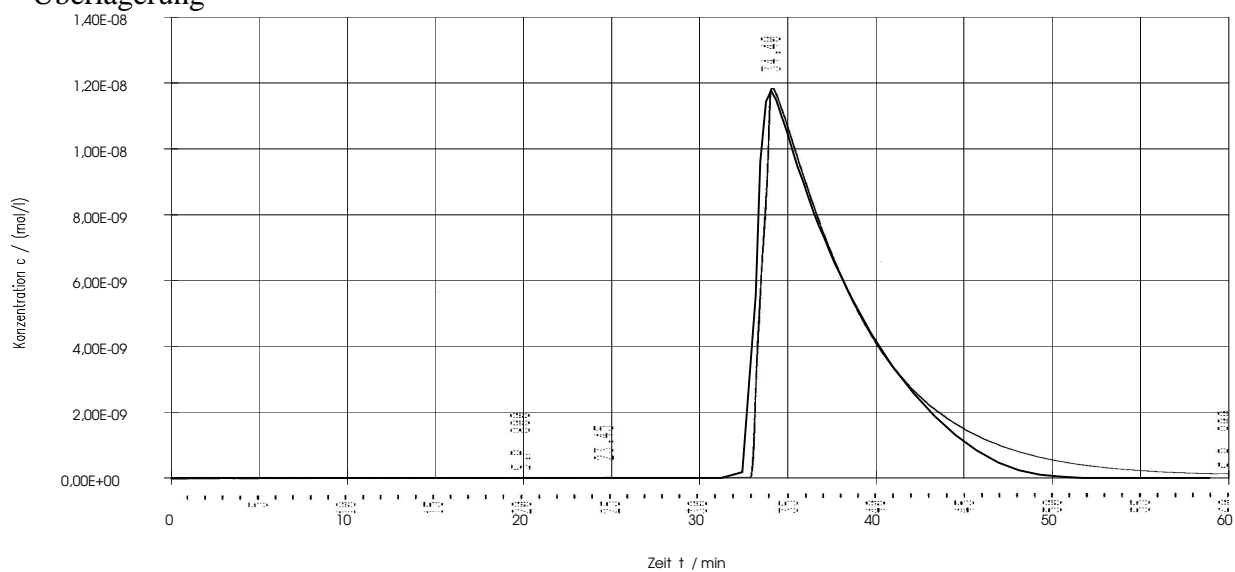
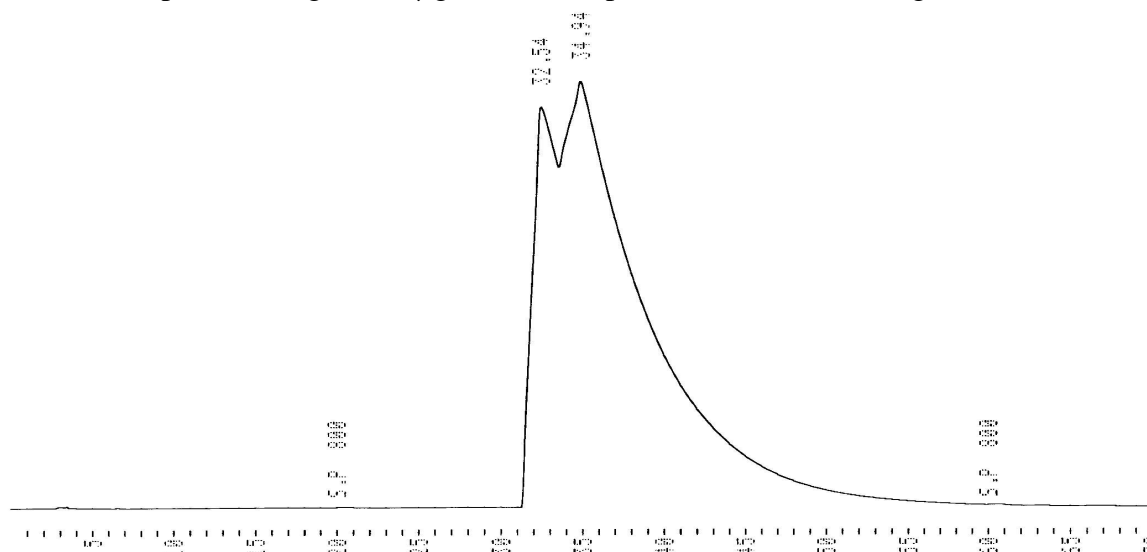
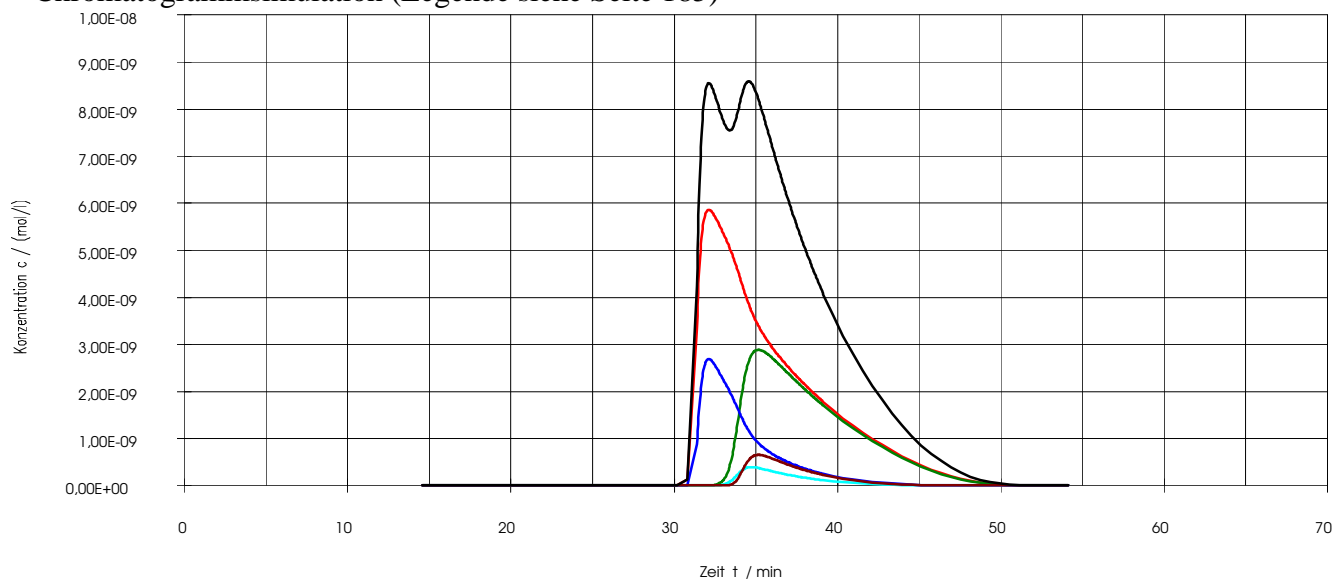


Abb. A13 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20µg, 33 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

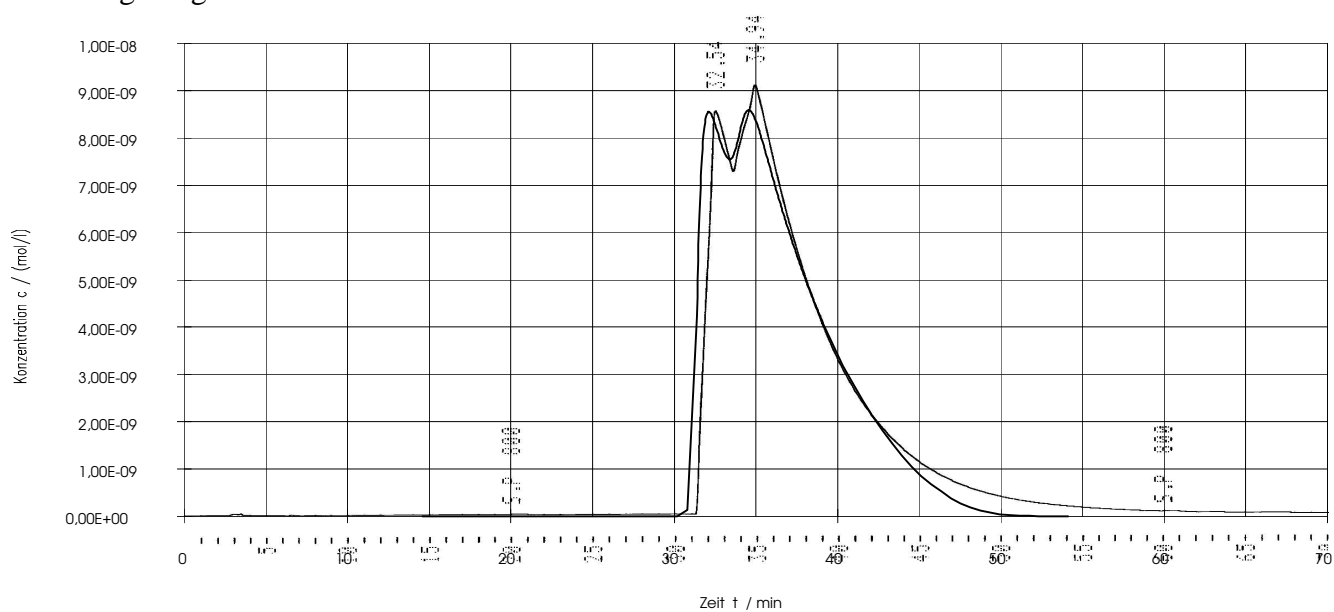
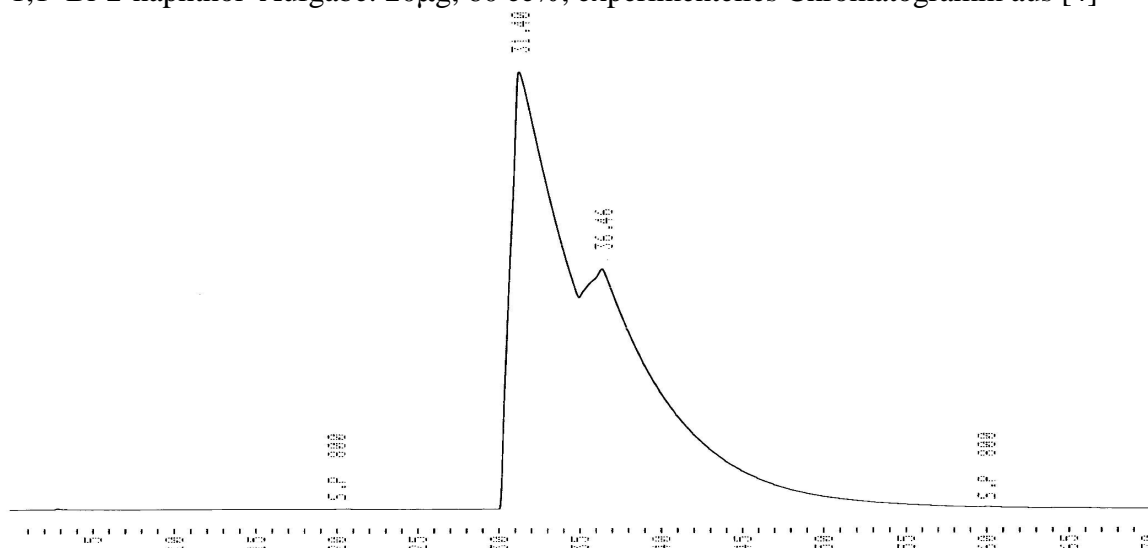
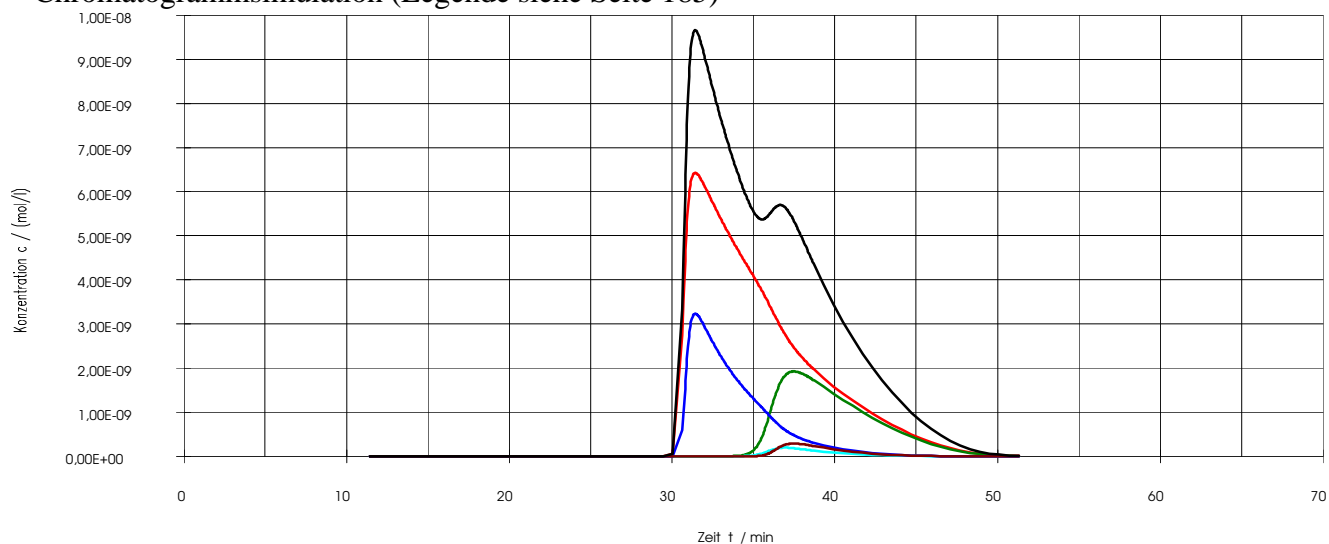


Abb. A14 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20µg, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

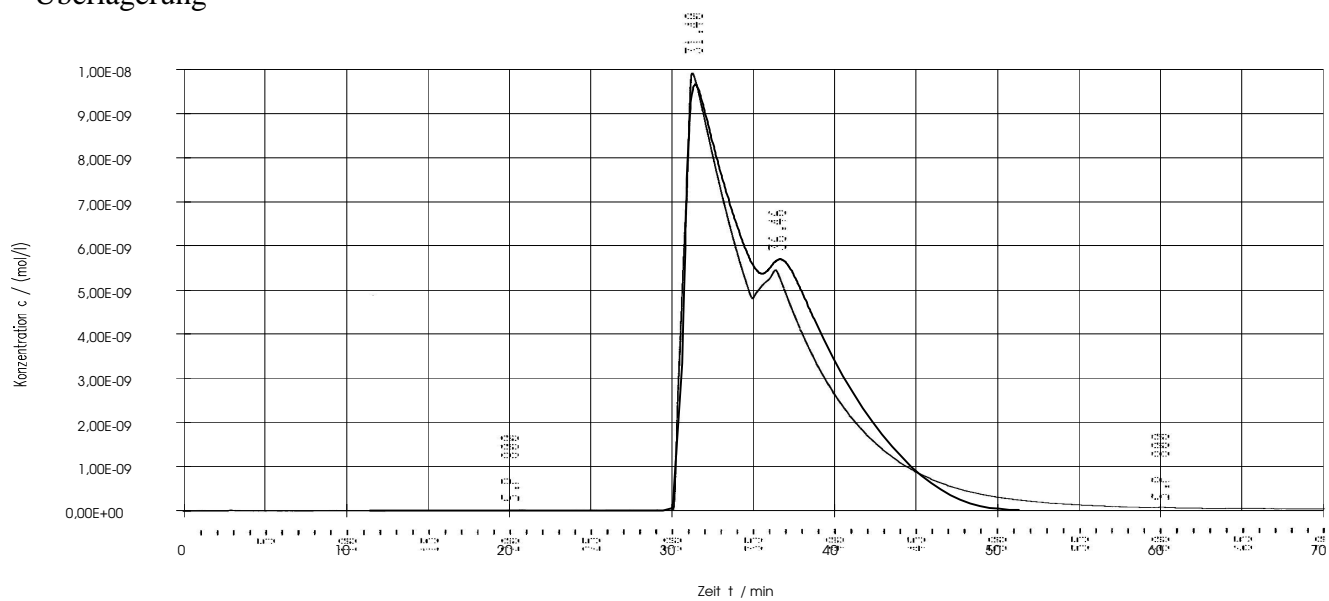
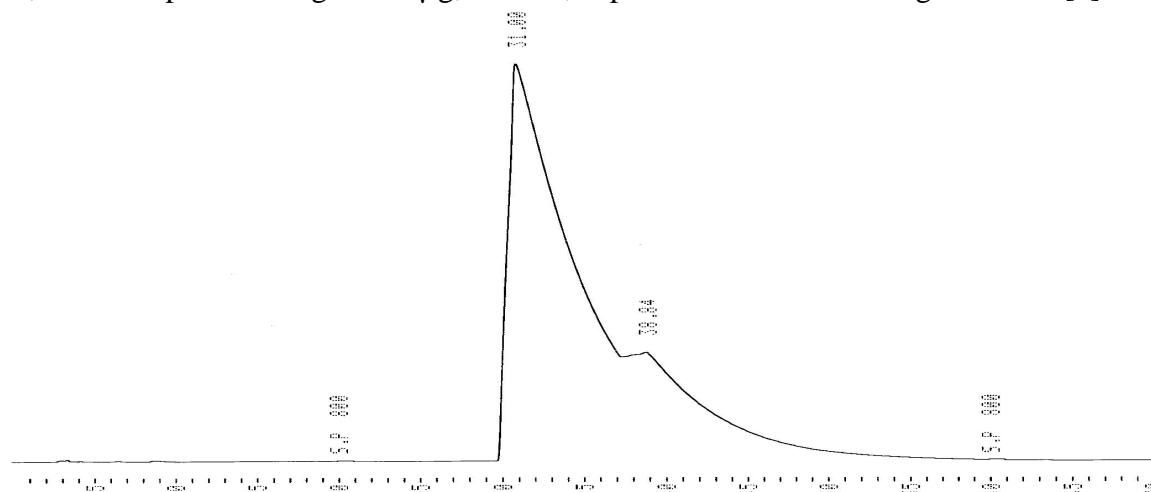
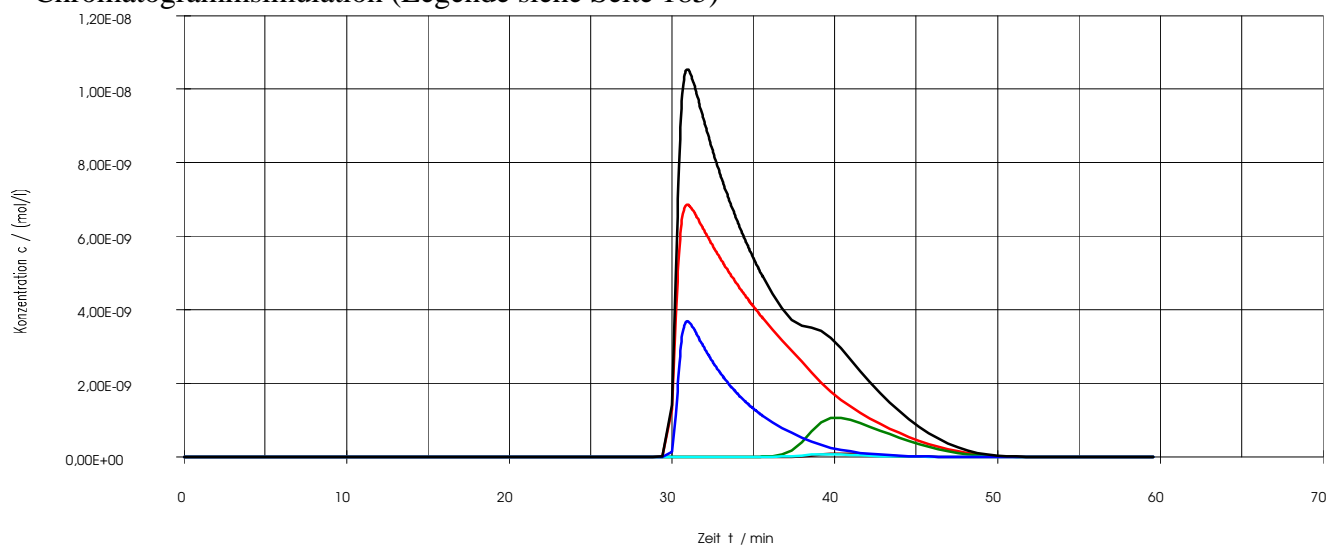




Abb. A15 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20µg, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

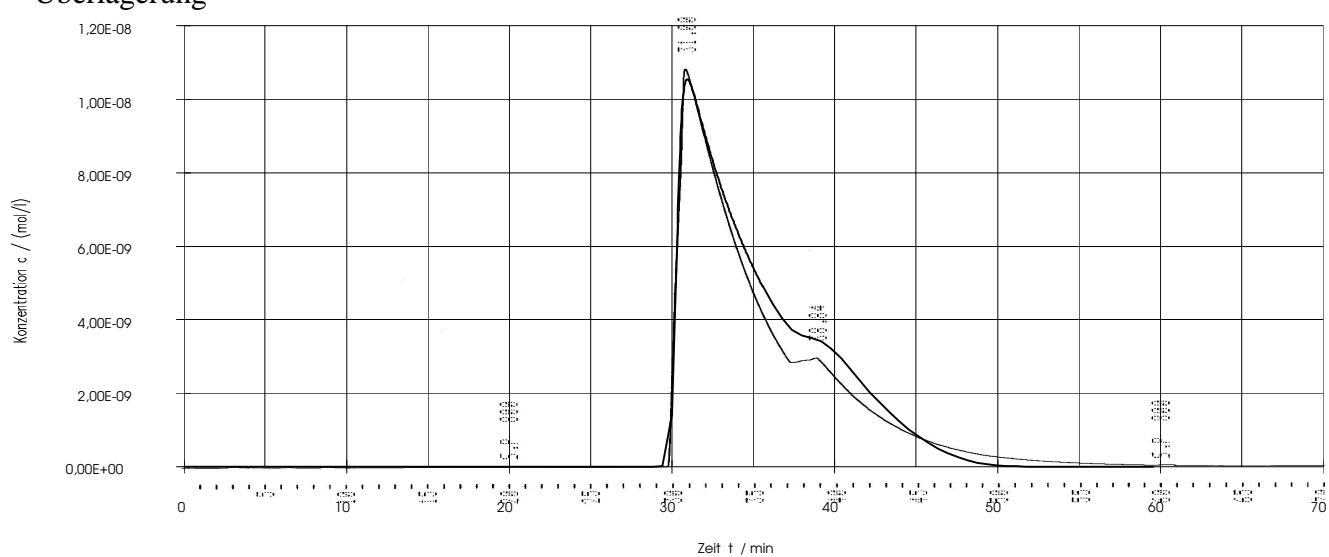
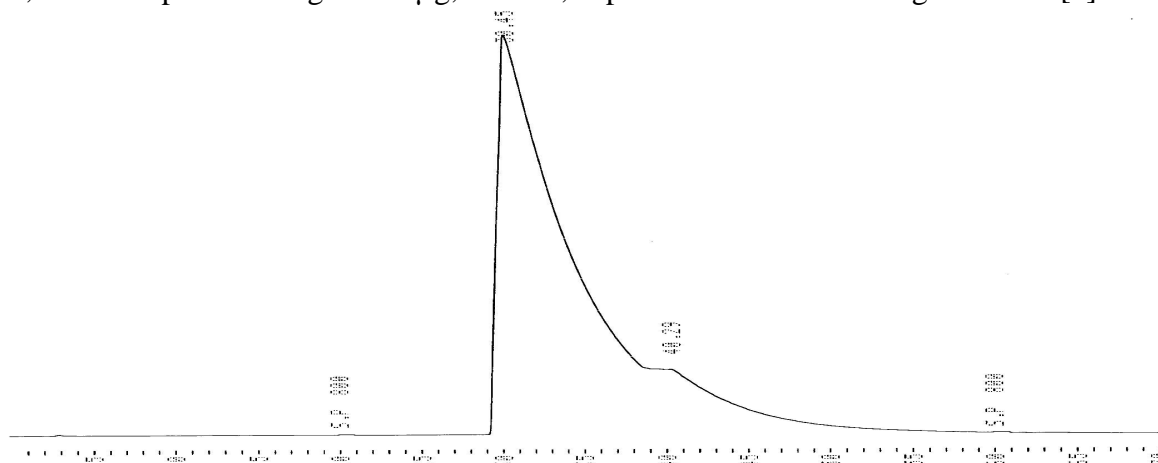
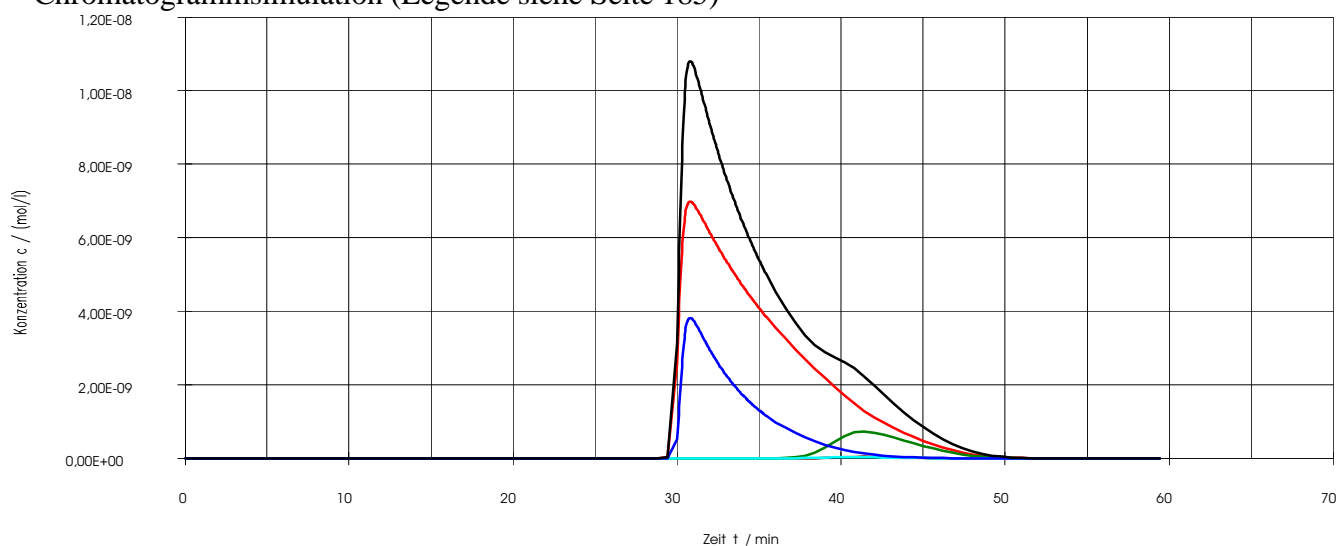


Abb. A16 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20µg, 86 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

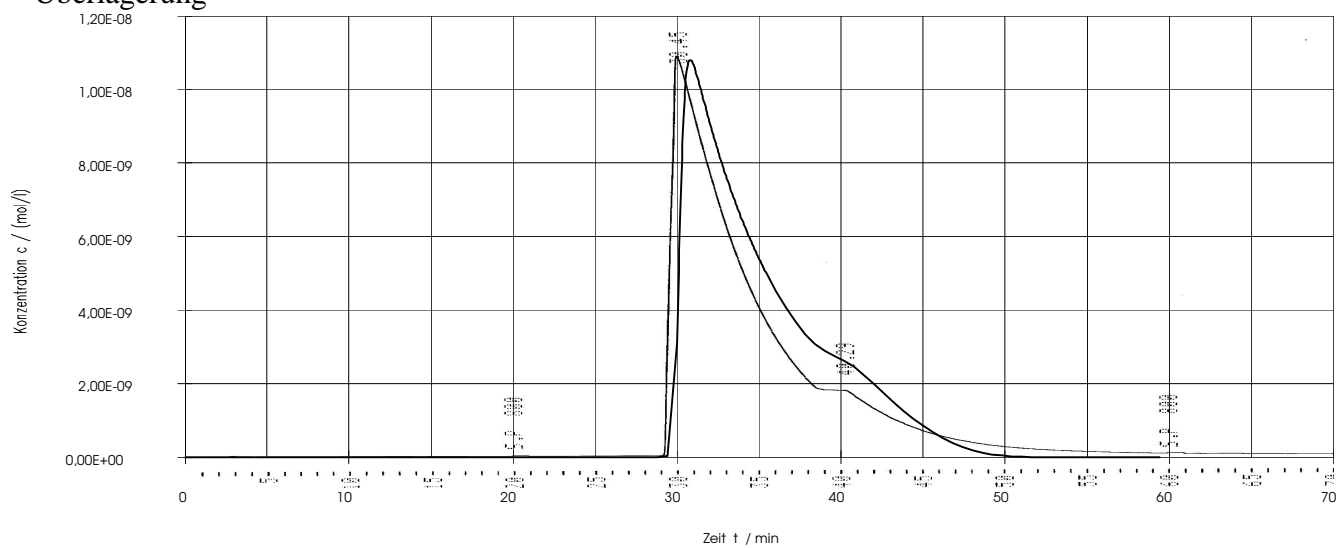
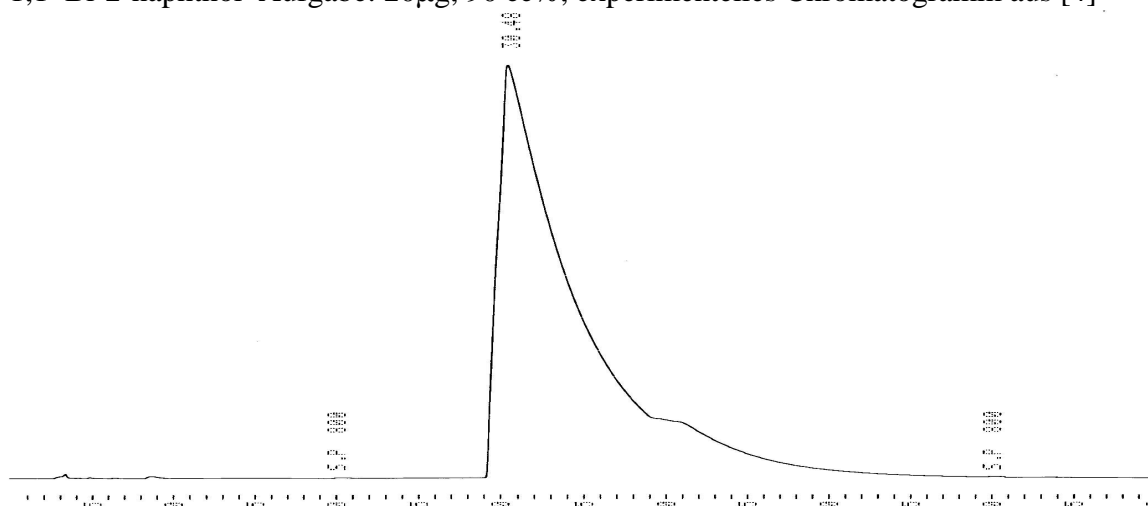
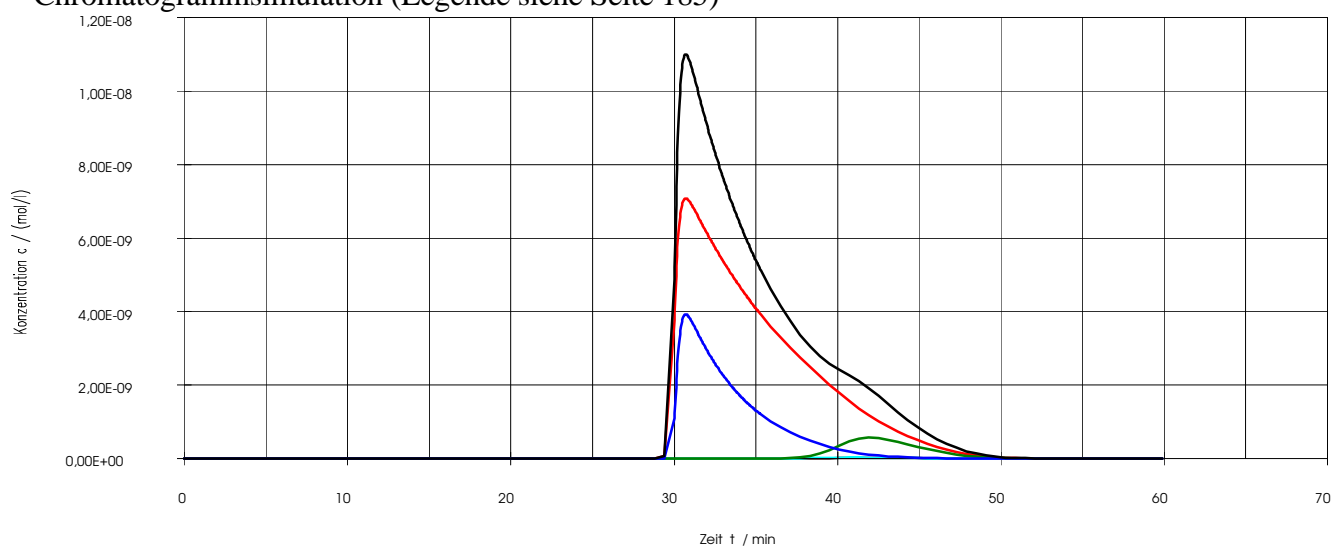


Abb. A17 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20µg, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

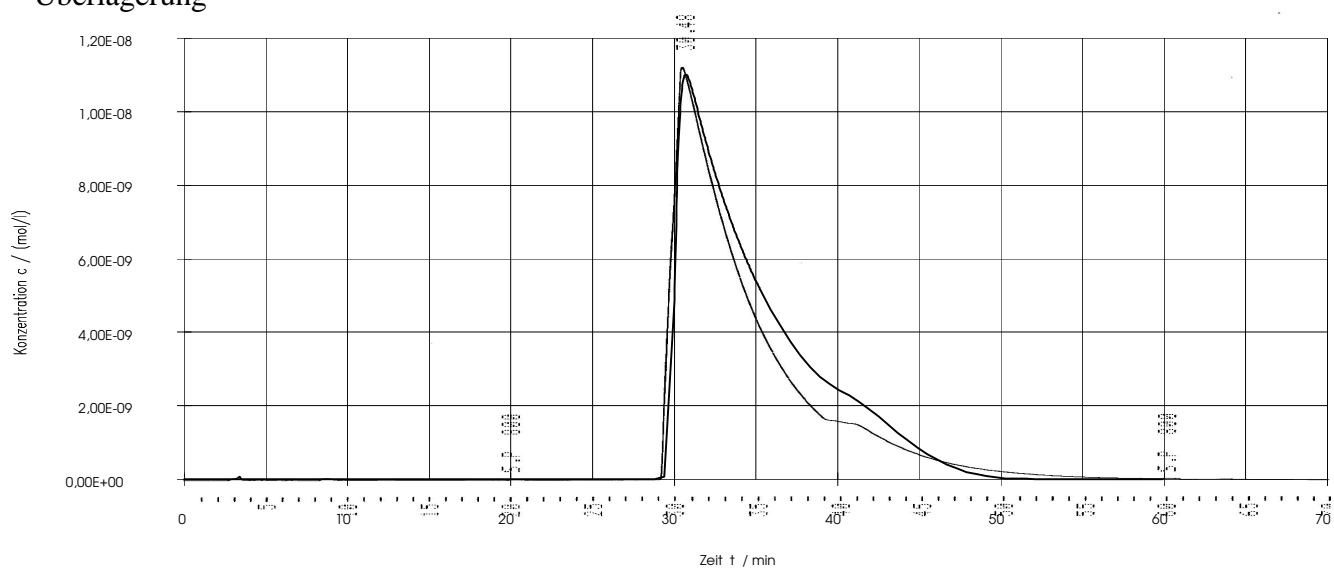
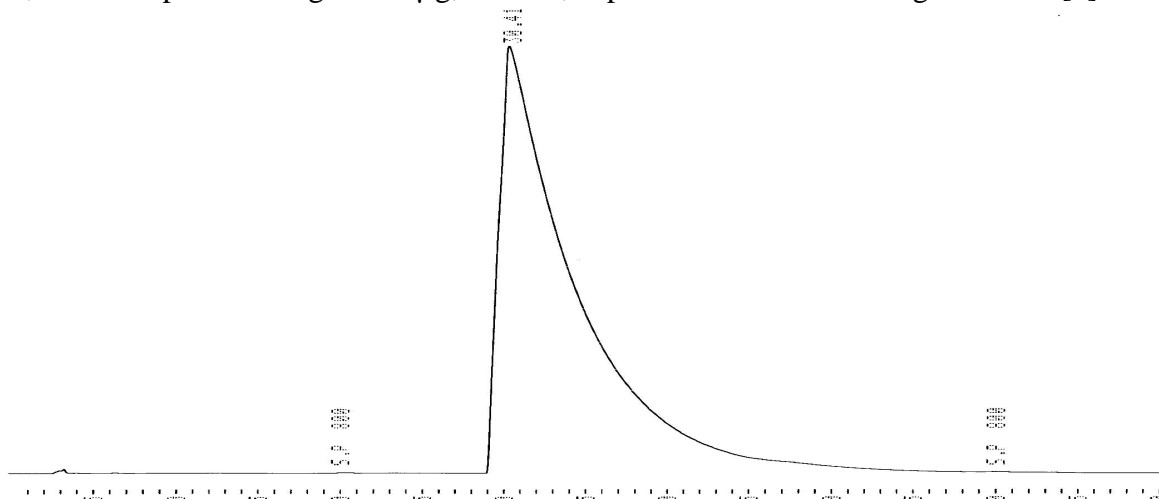
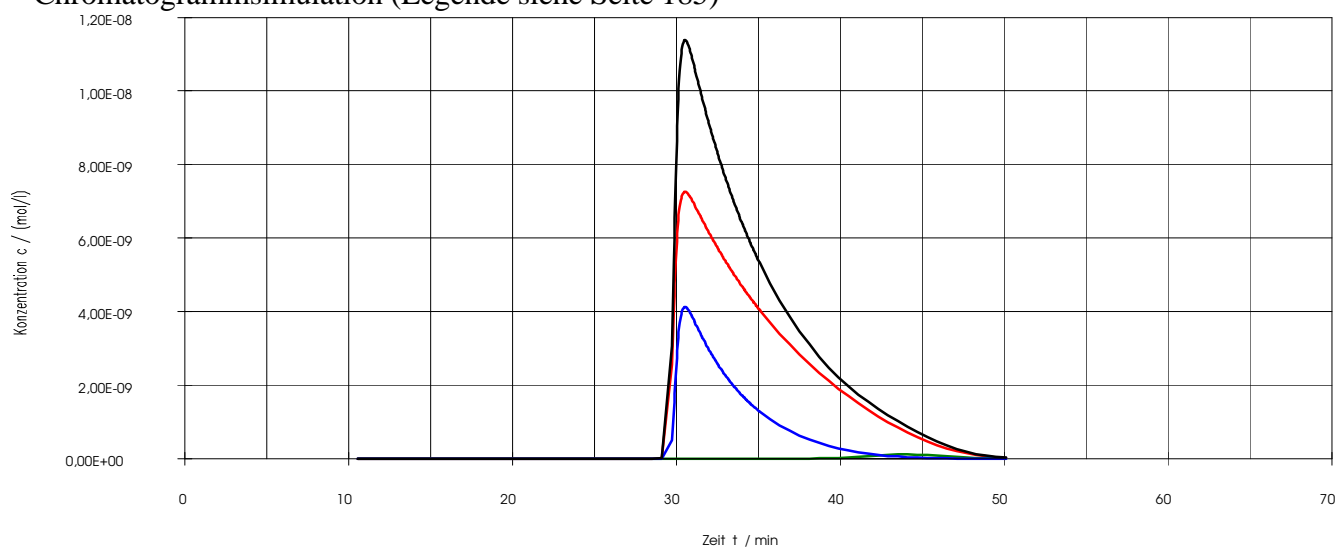


Abb. A18 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 20µg, 98 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

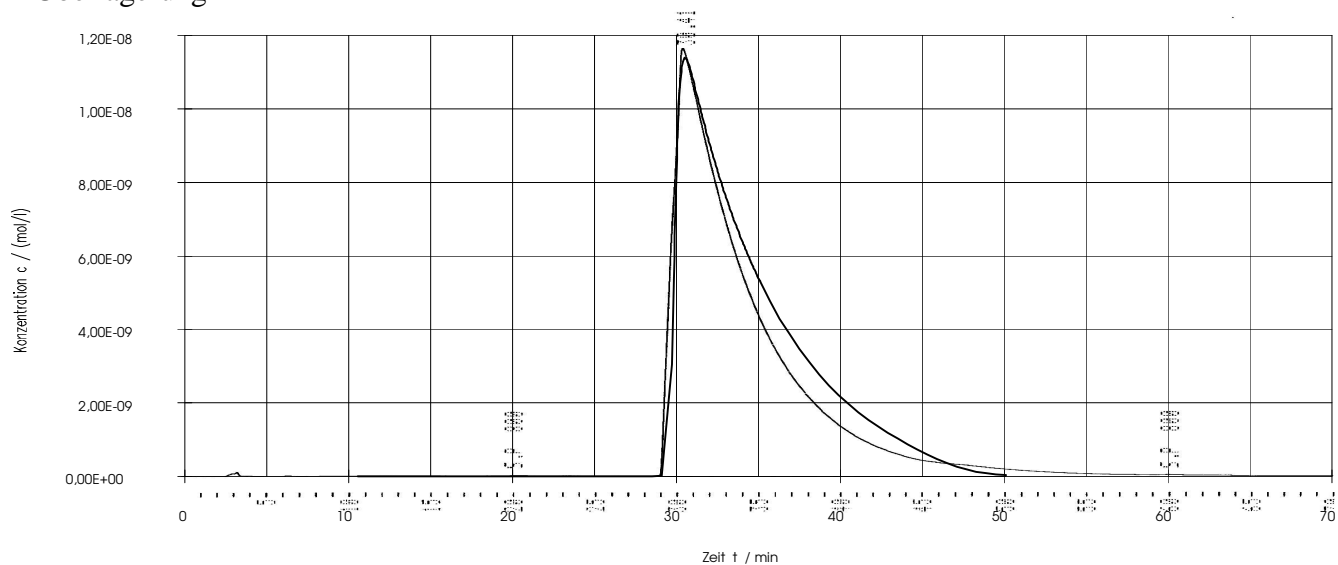
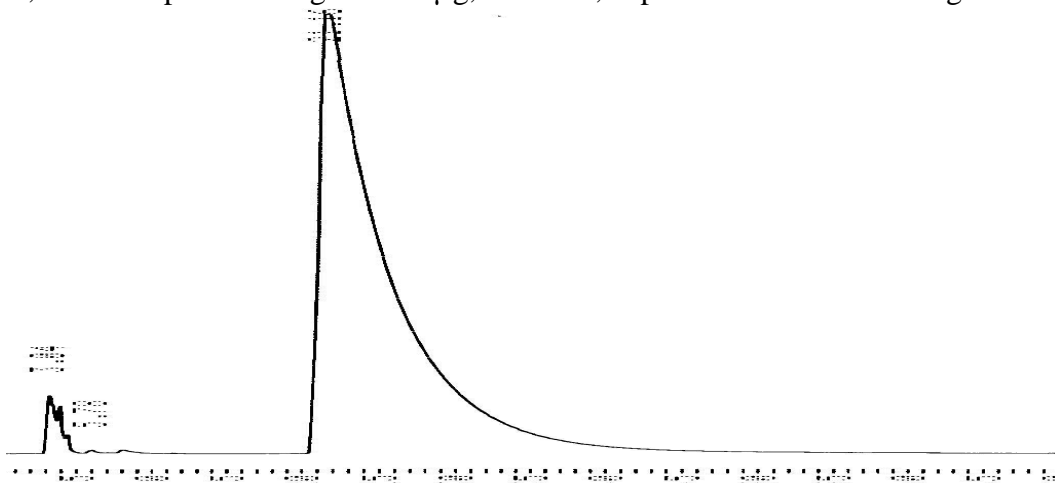
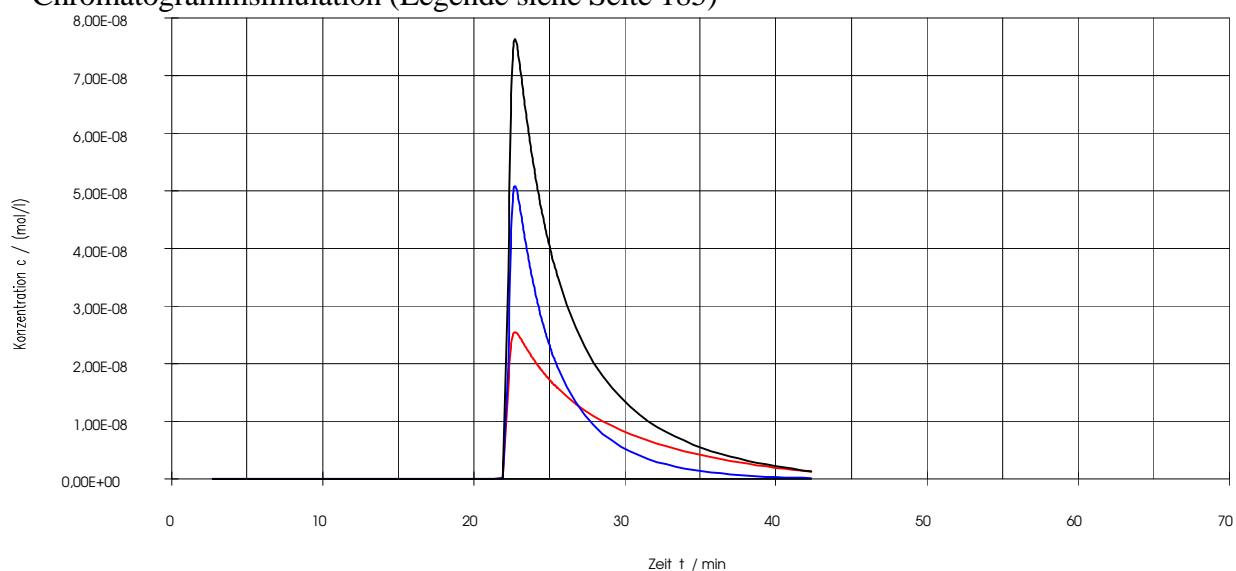


Abb. A19 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

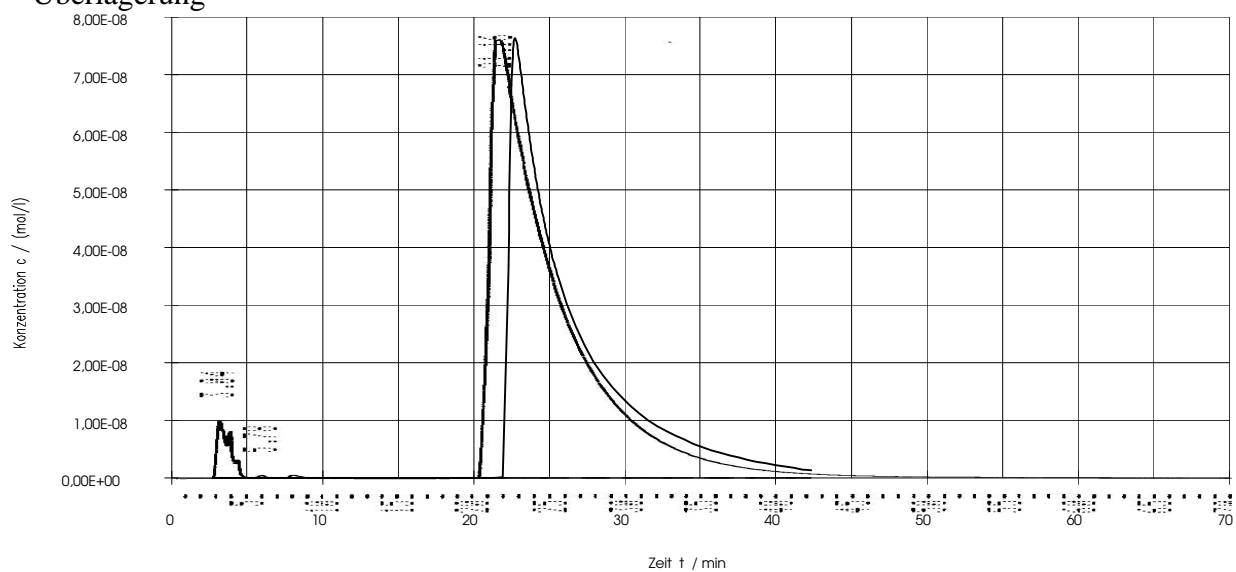
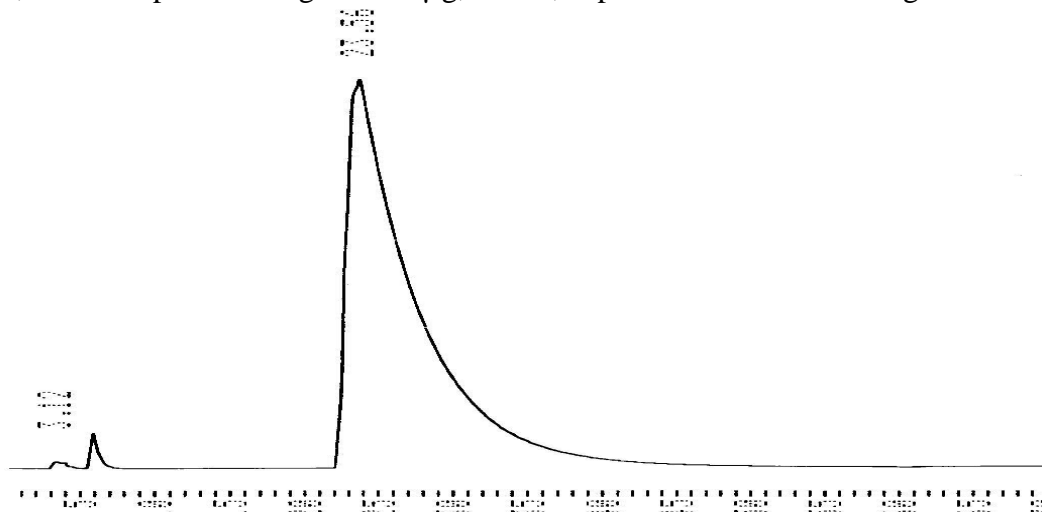
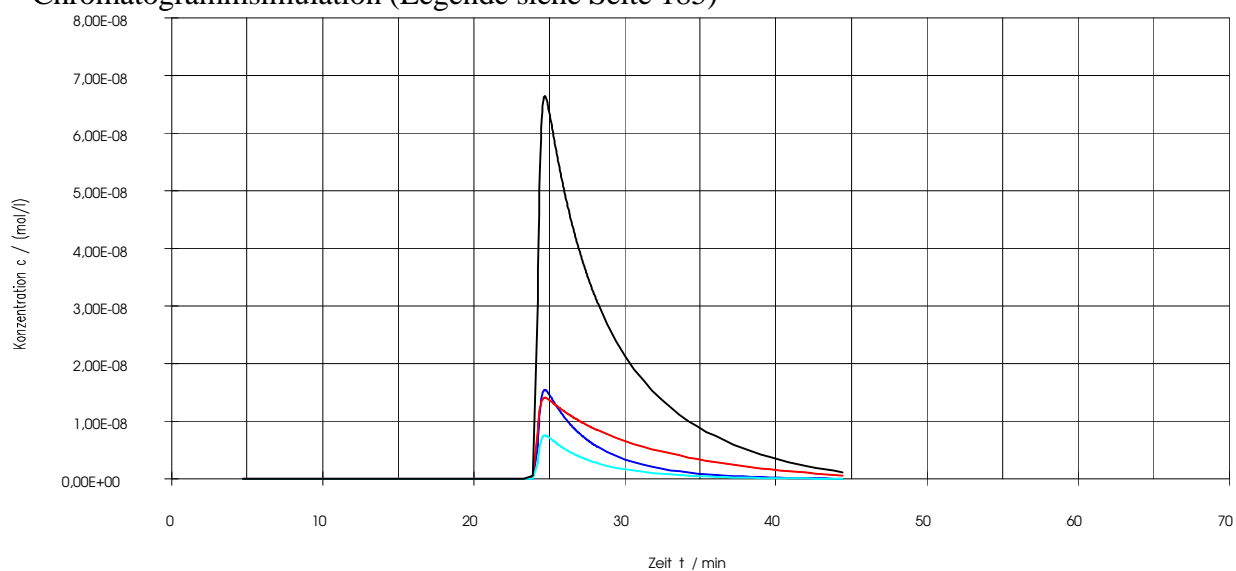


Abb. A20 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

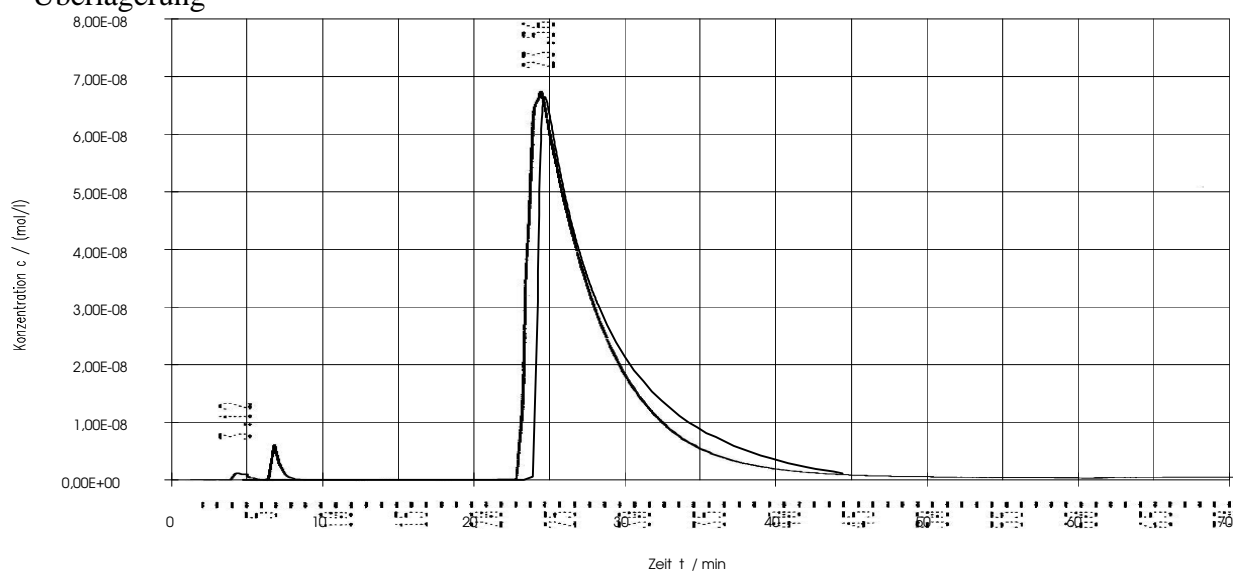
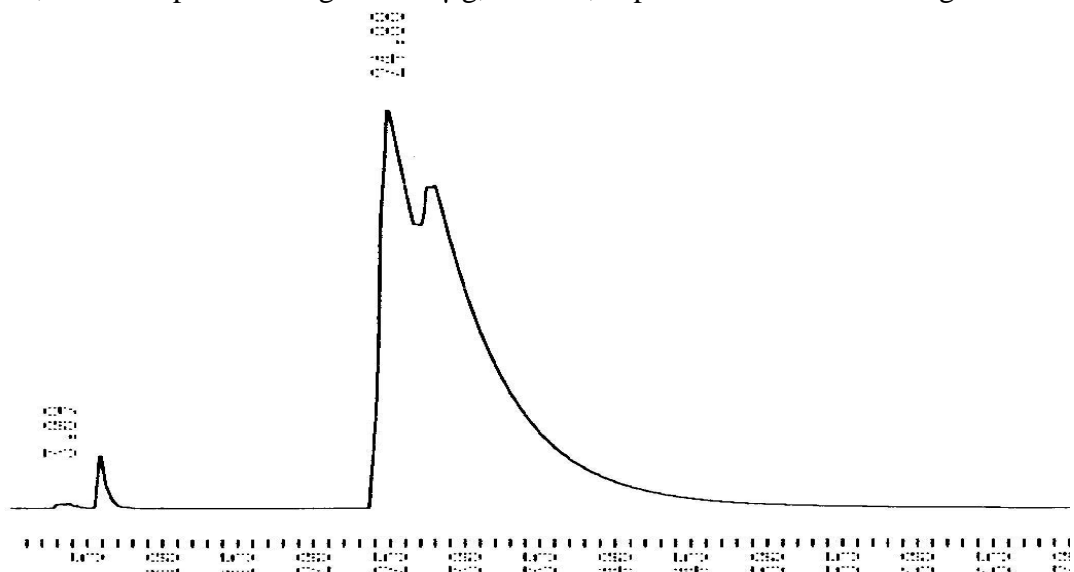
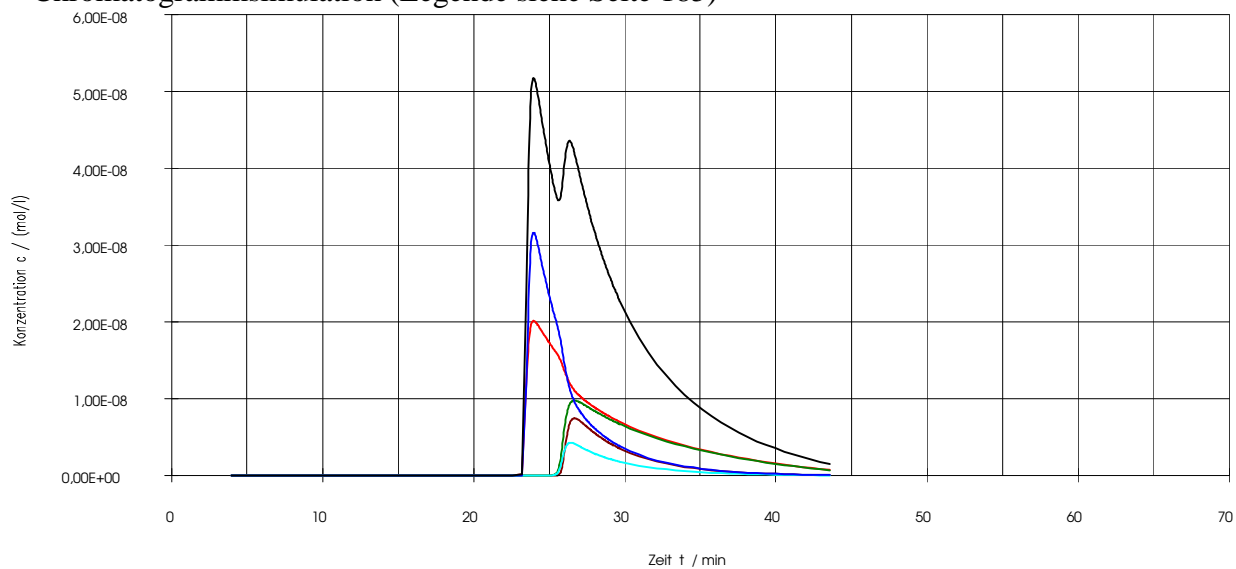


Abb. A21 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 33 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

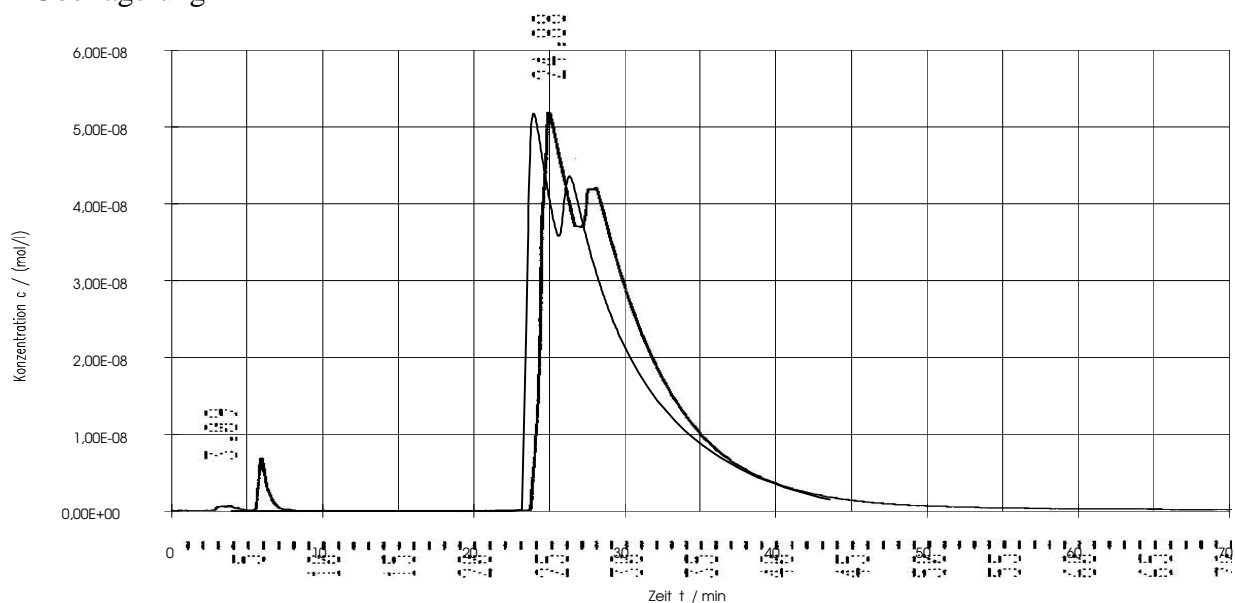
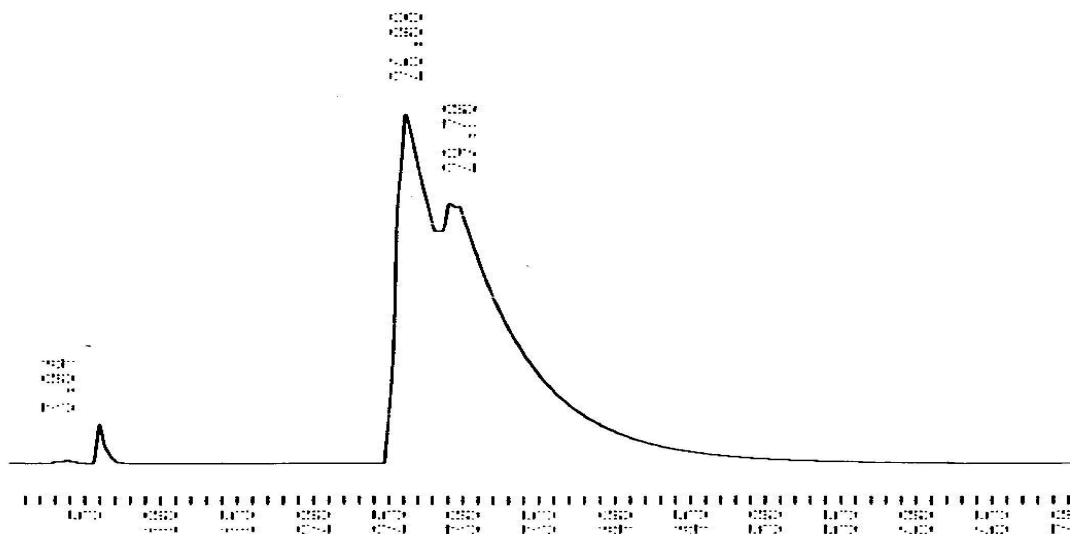
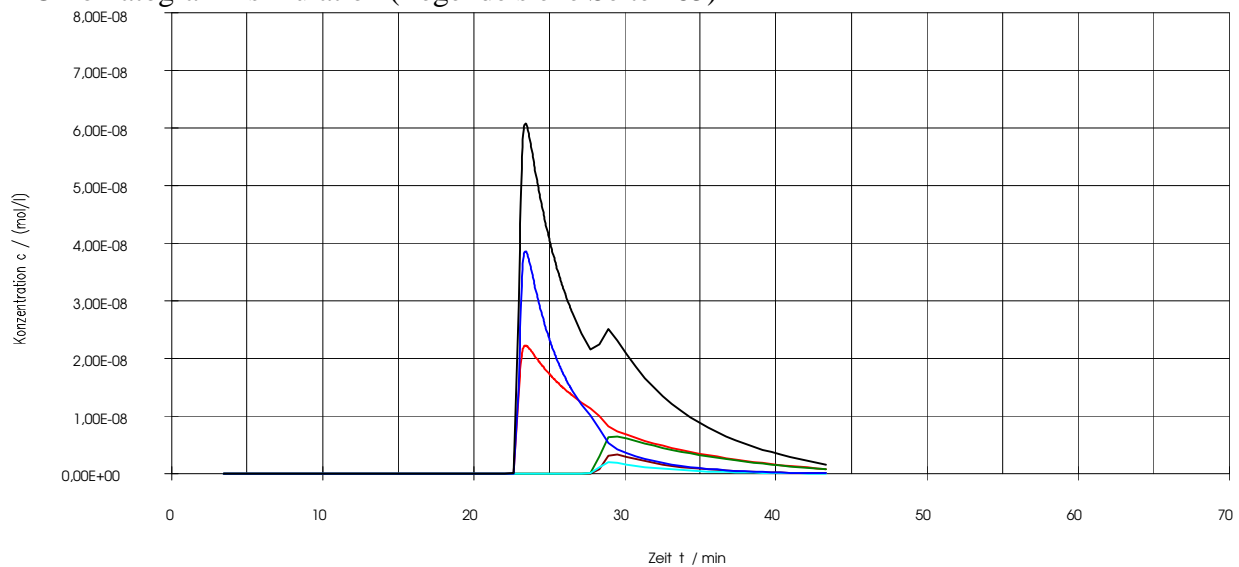


Abb. A22 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100µg, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

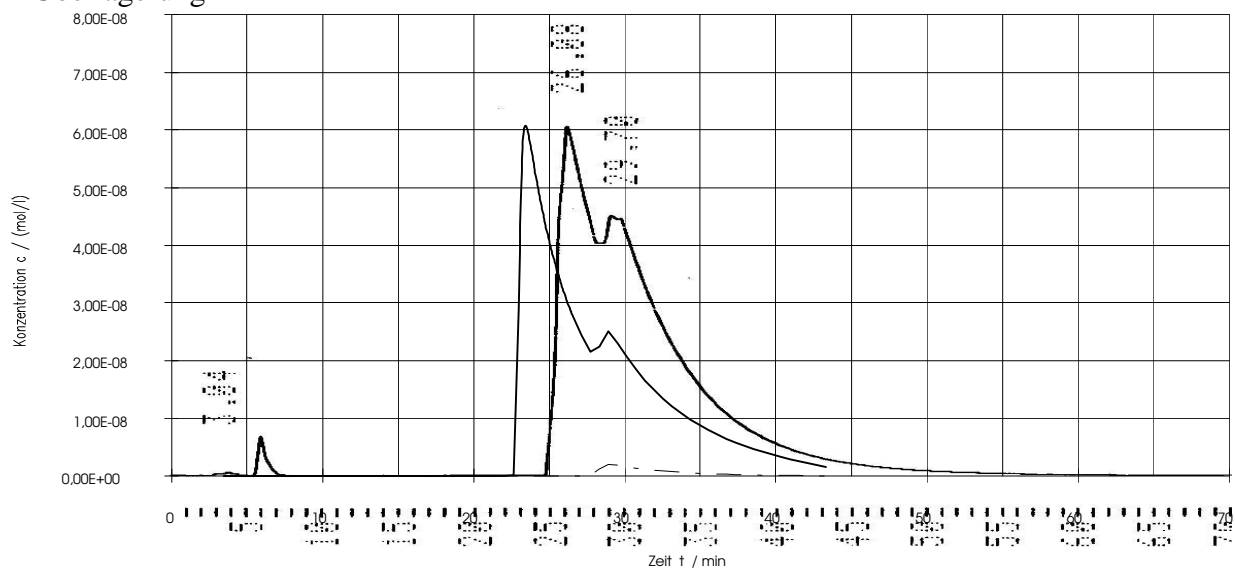
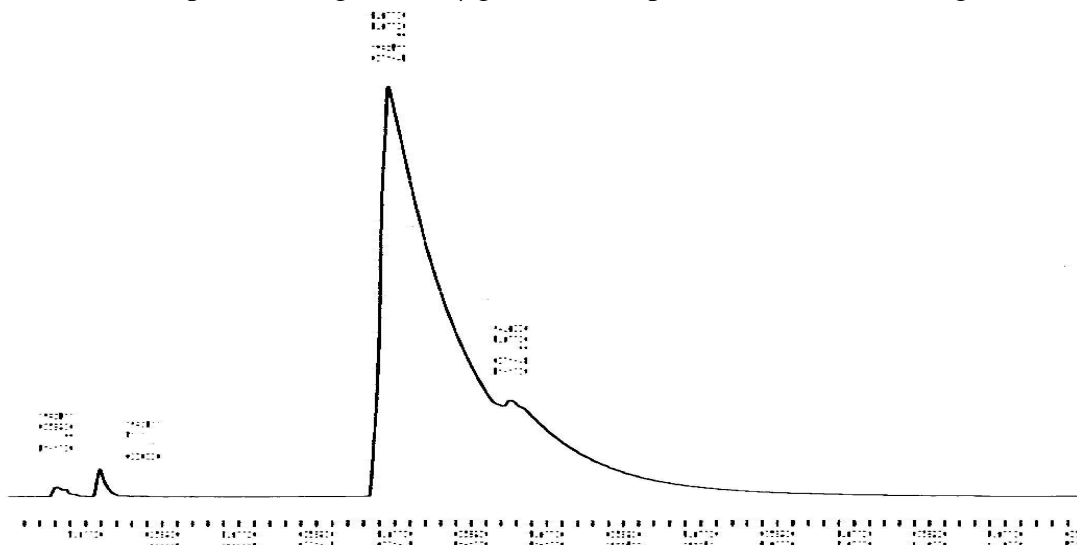
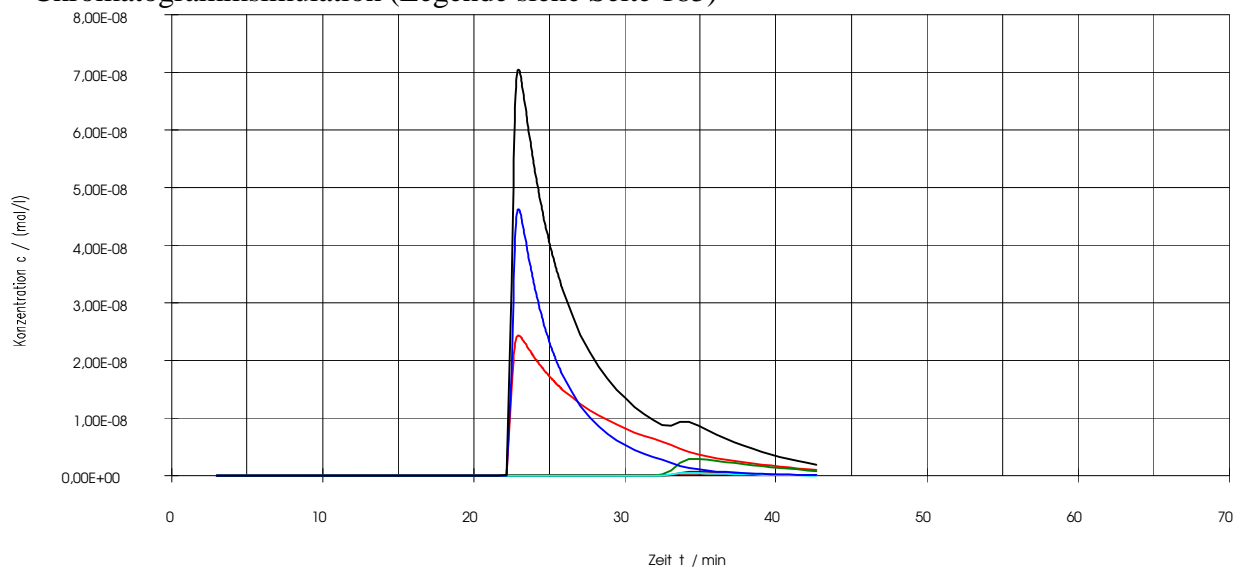




Abb. A23 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 86 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

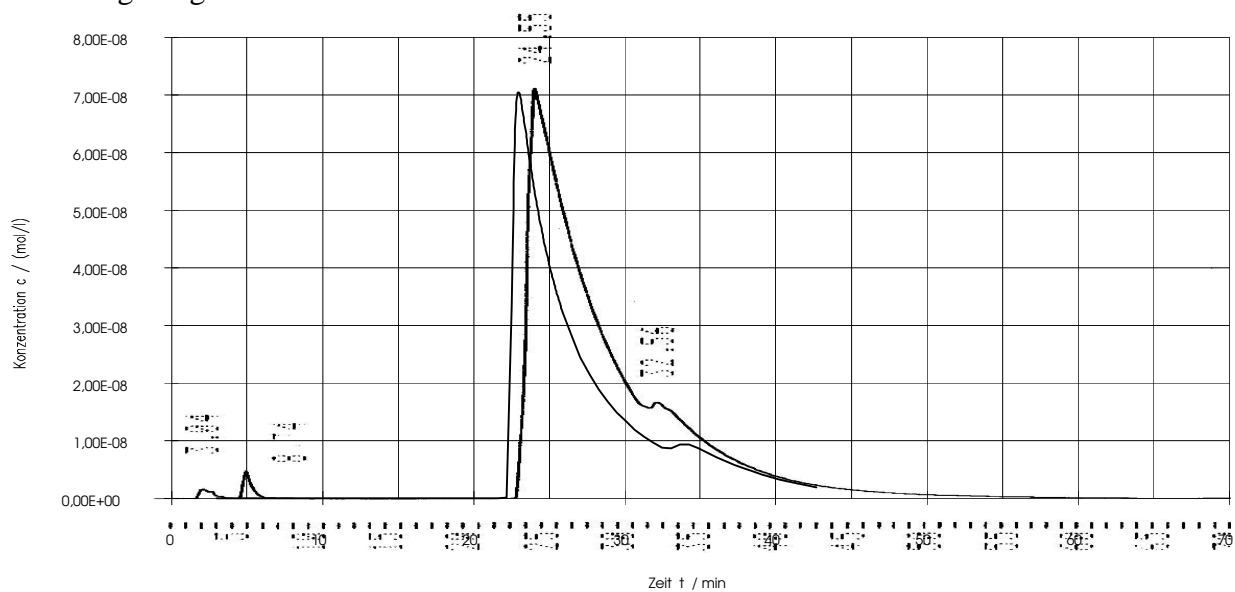
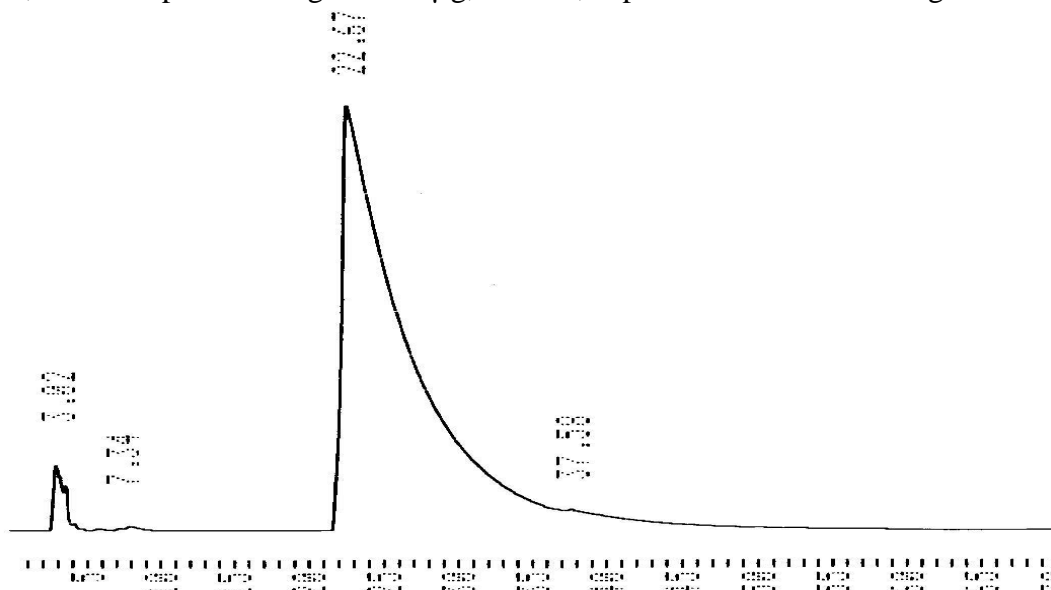
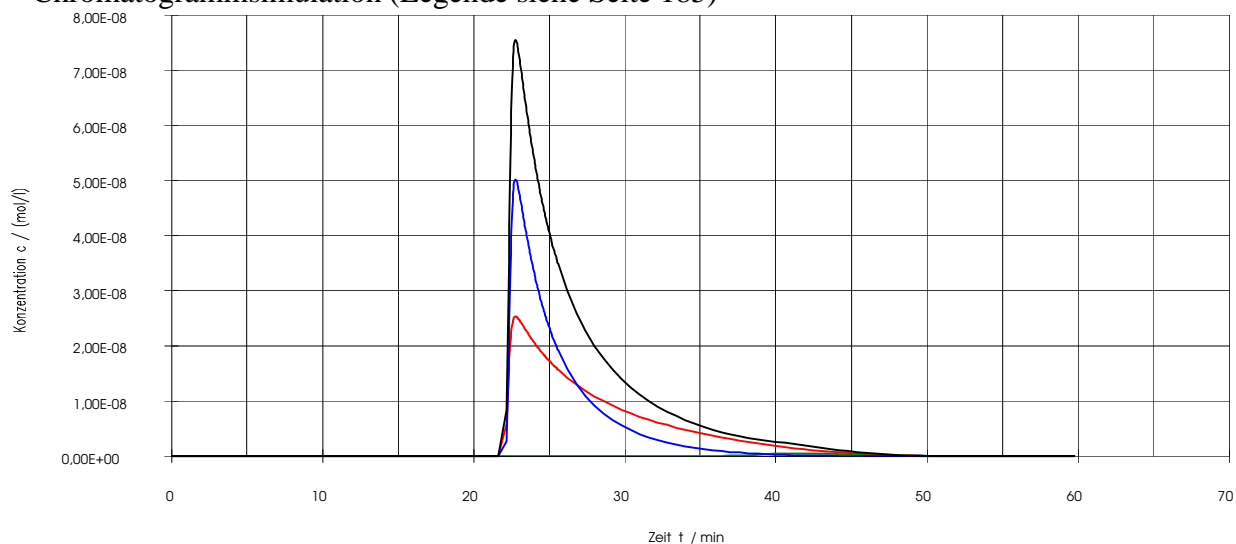


Abb. A24 : 1,1'-Bi-2-naphthol Aufgabe: 100 $\mu$ g, 98 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

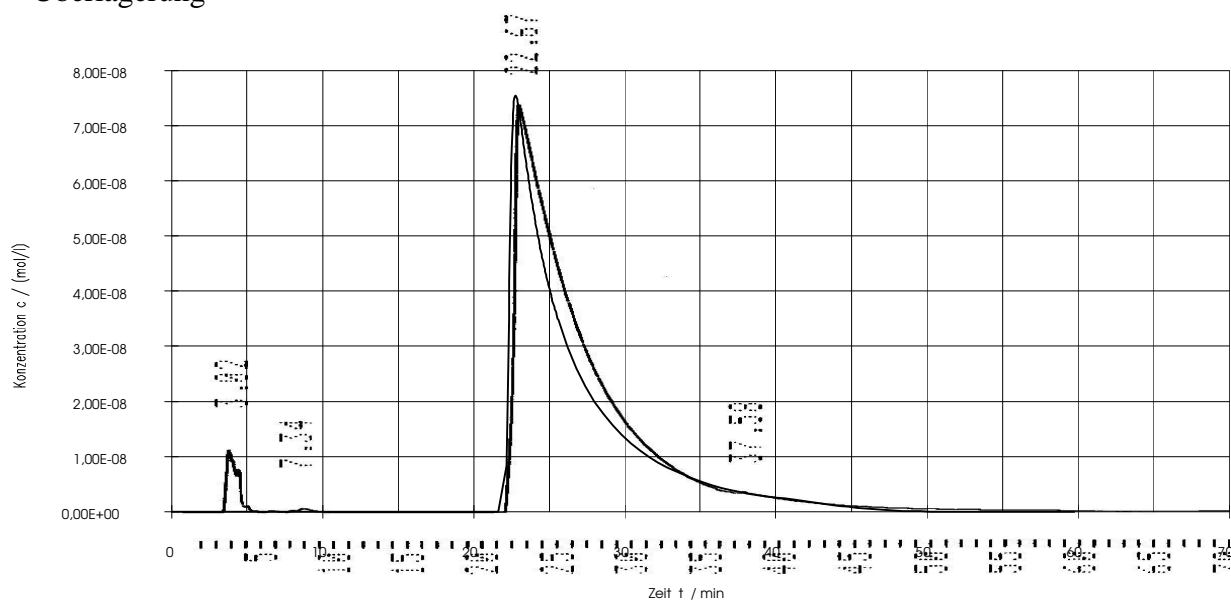
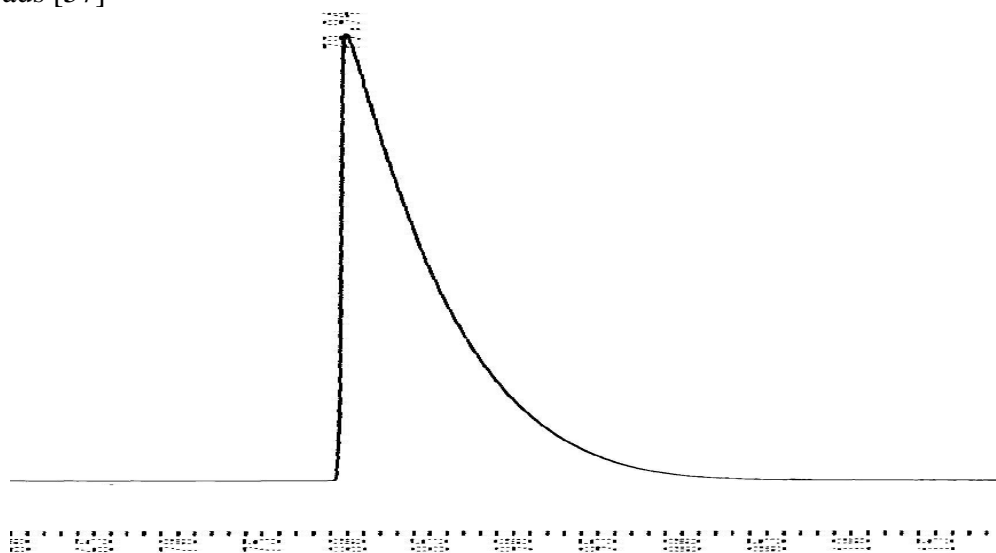
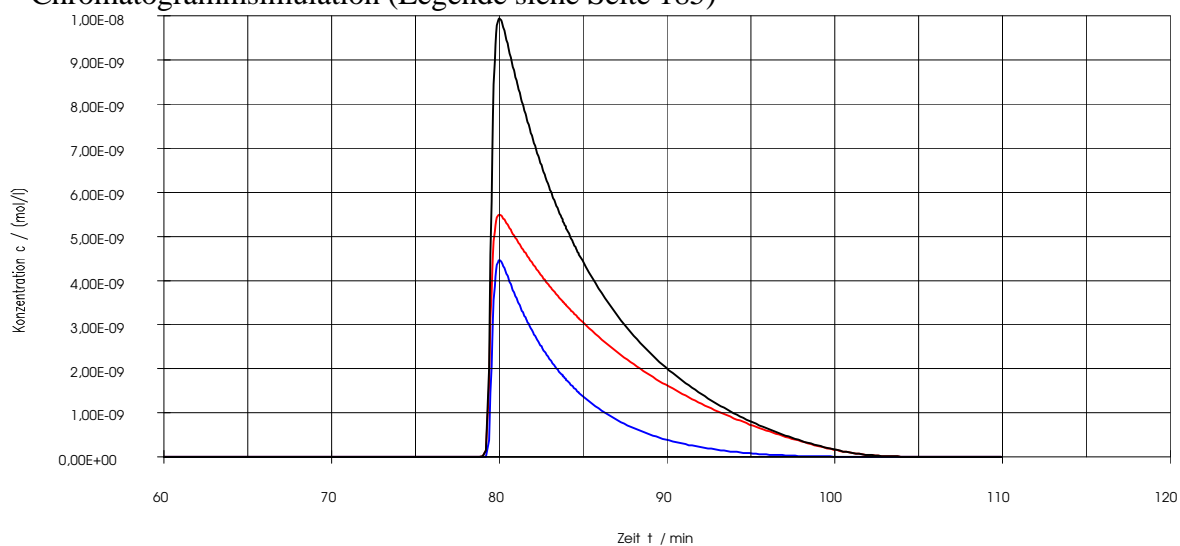


Abb. A25 : 2,2'-Dimethoxy-1,1-binaphthyl Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [57]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

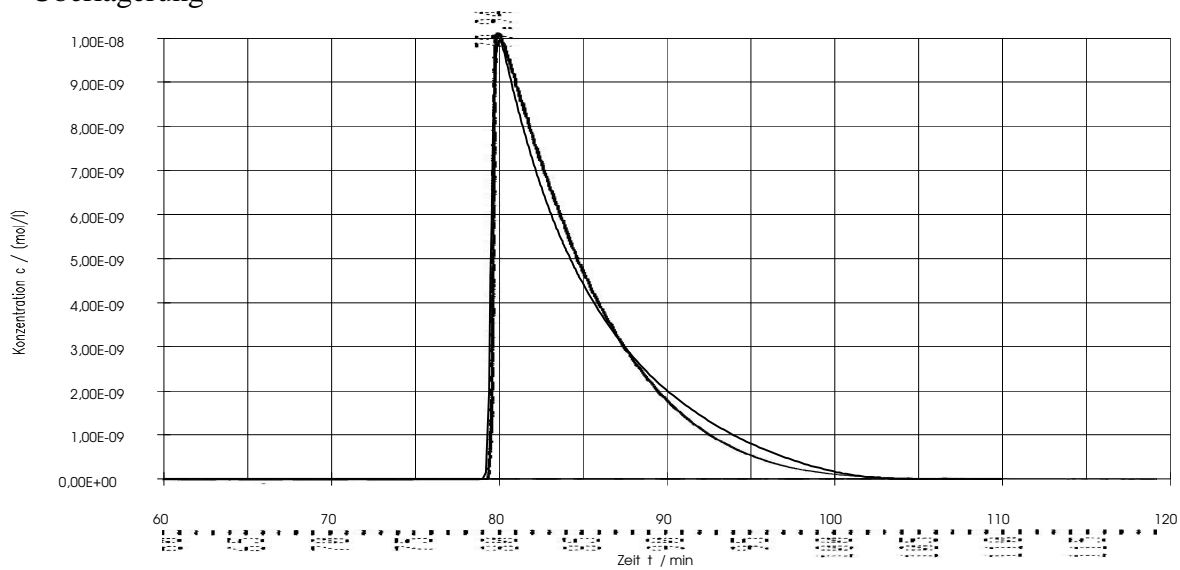
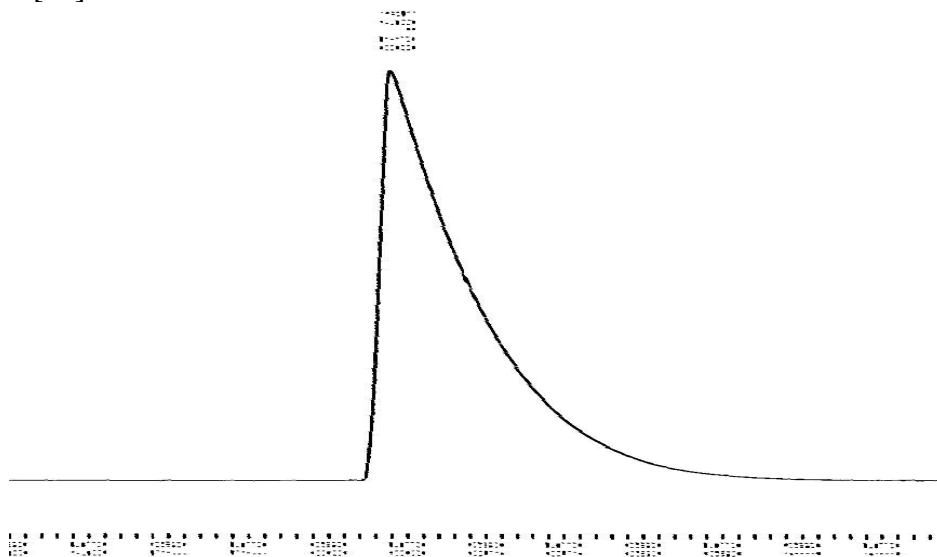
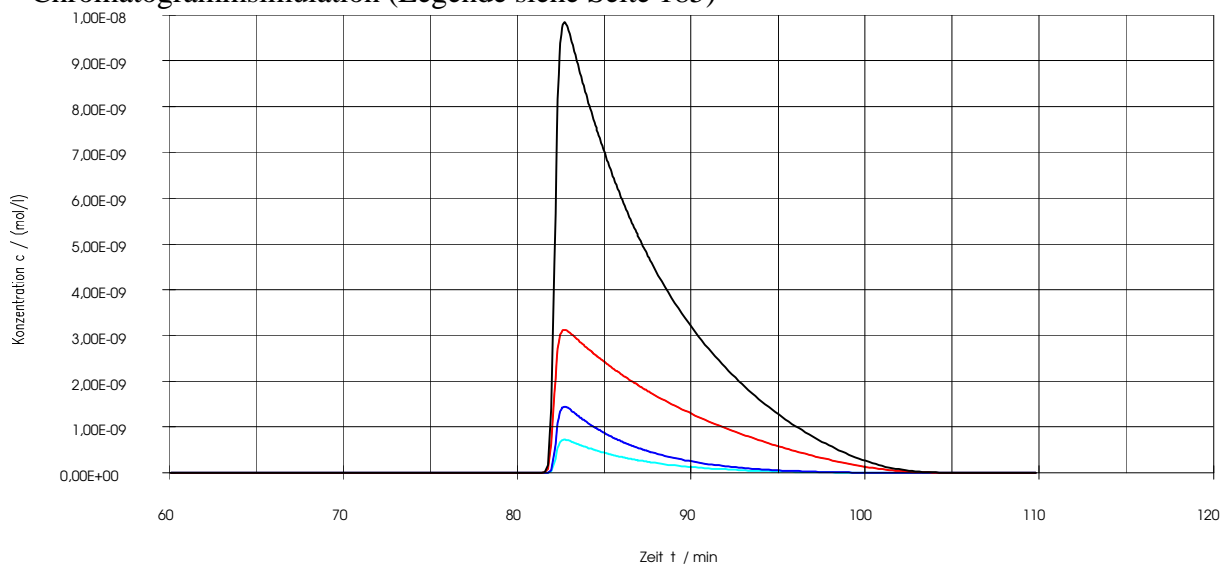


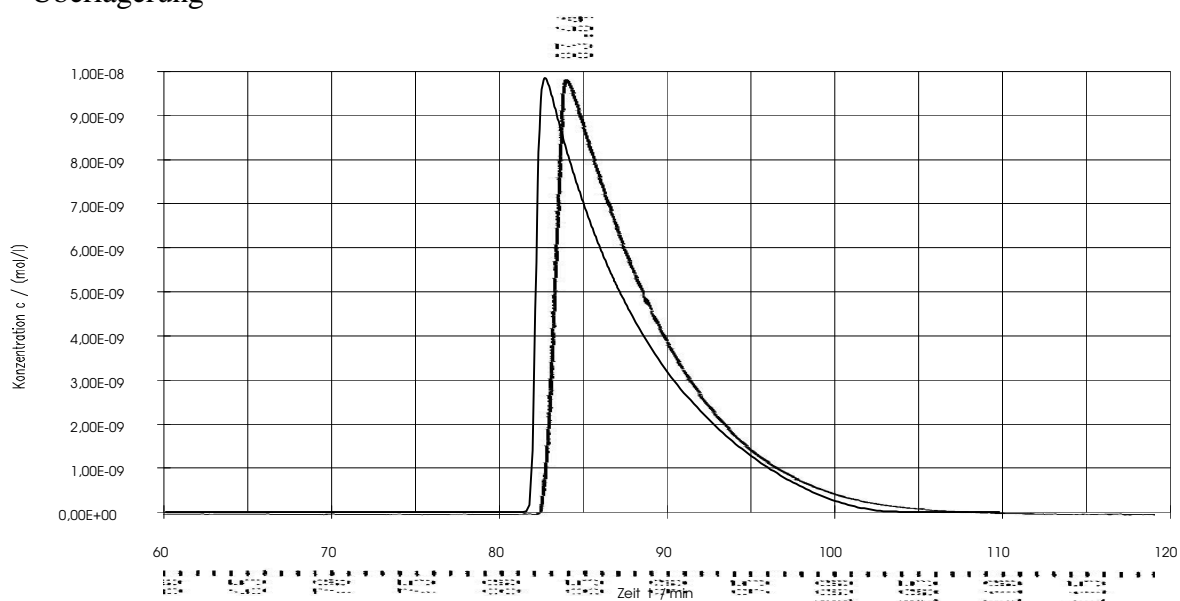
Abb. A26 : 2,2'-Dimethoxy-1,1-binaphthyl Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [57]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



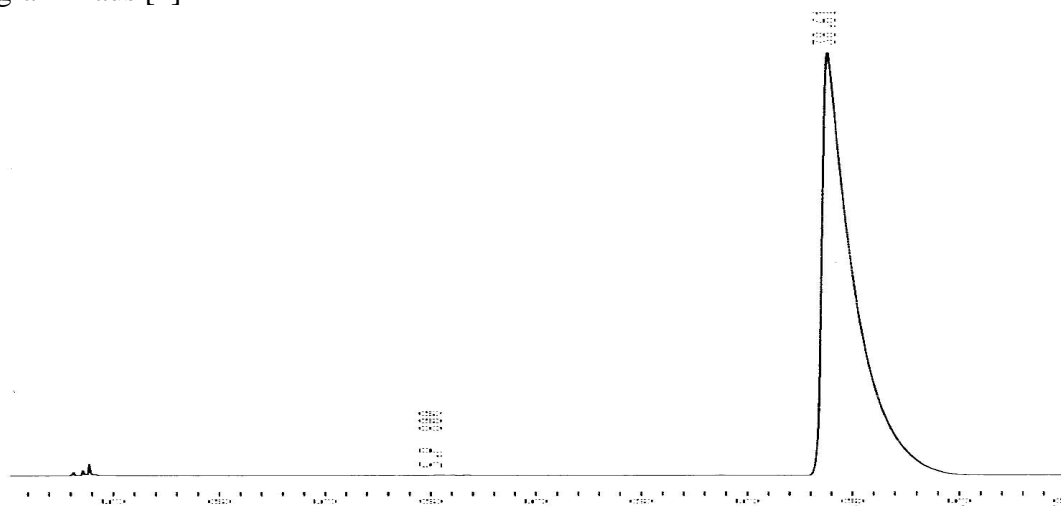
Überlagerung



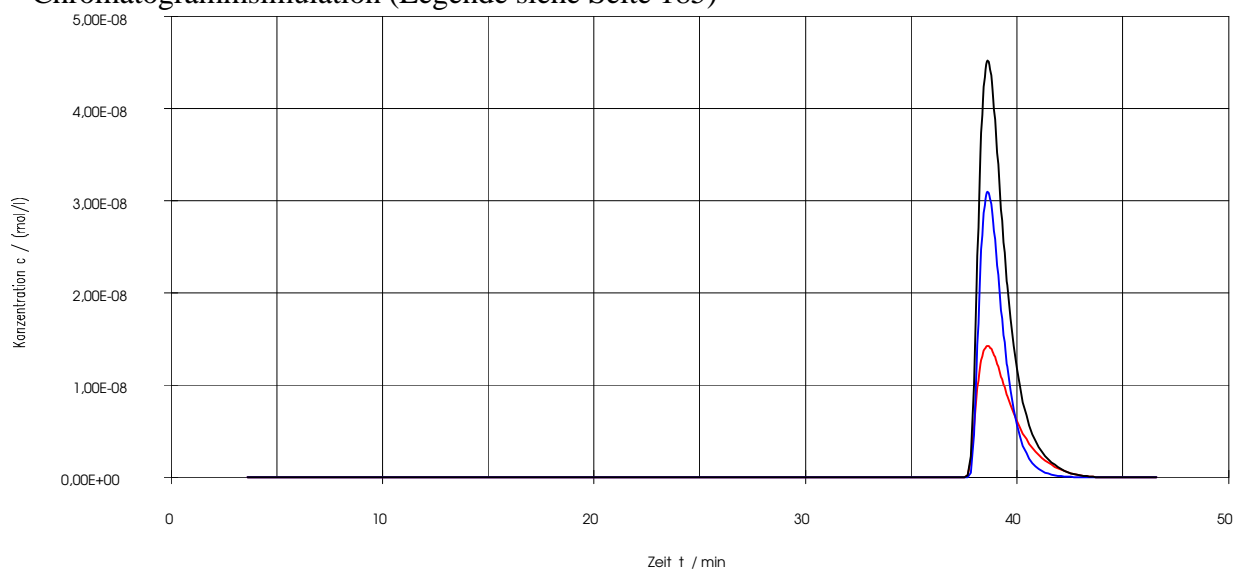
Chromatogram showing peaks at retention times: 0.77, 0.14, 0.95, 0.94, 0.93, 0.92, and 0.91. The x-axis is labeled 'Time' and the y-axis is labeled 'Intensity'.

Chromatogram showing concentration  $c$  / (mol/l) versus time  $t$  / min. The y-axis ranges from 0.00E+00 to 1.00E-08. The x-axis ranges from 0 to 110 minutes. Two main peaks are visible: one at approximately 5.5 minutes and another at approximately 81 minutes. The peak at 81 minutes is significantly larger than the one at 5.5 minutes. There are also several small peaks between 85 and 95 minutes.

Abb. A28 : N-Benzoyl-alaninbenzylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

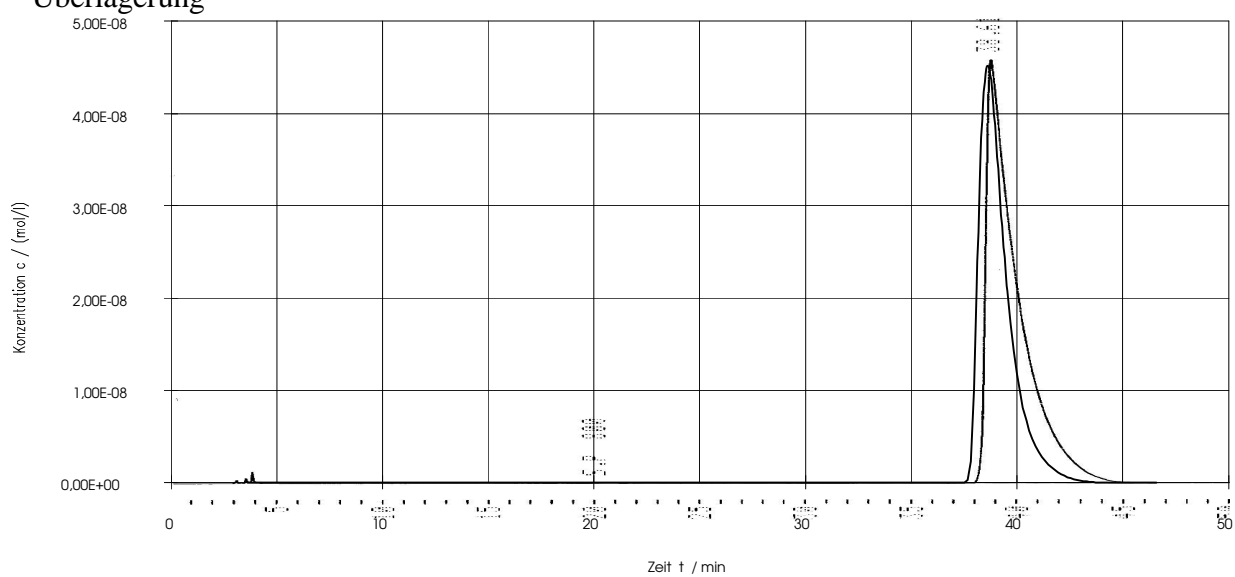
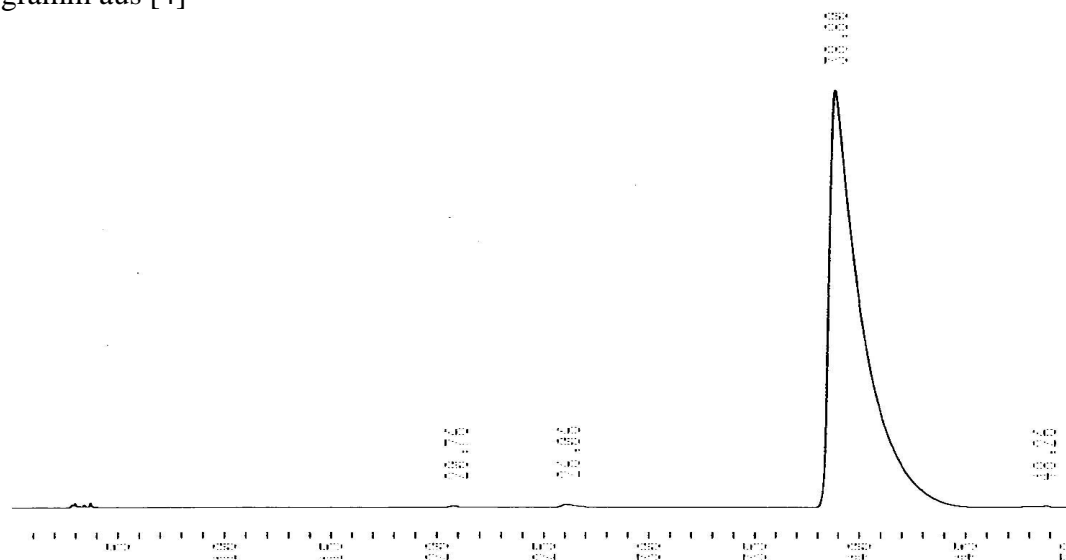
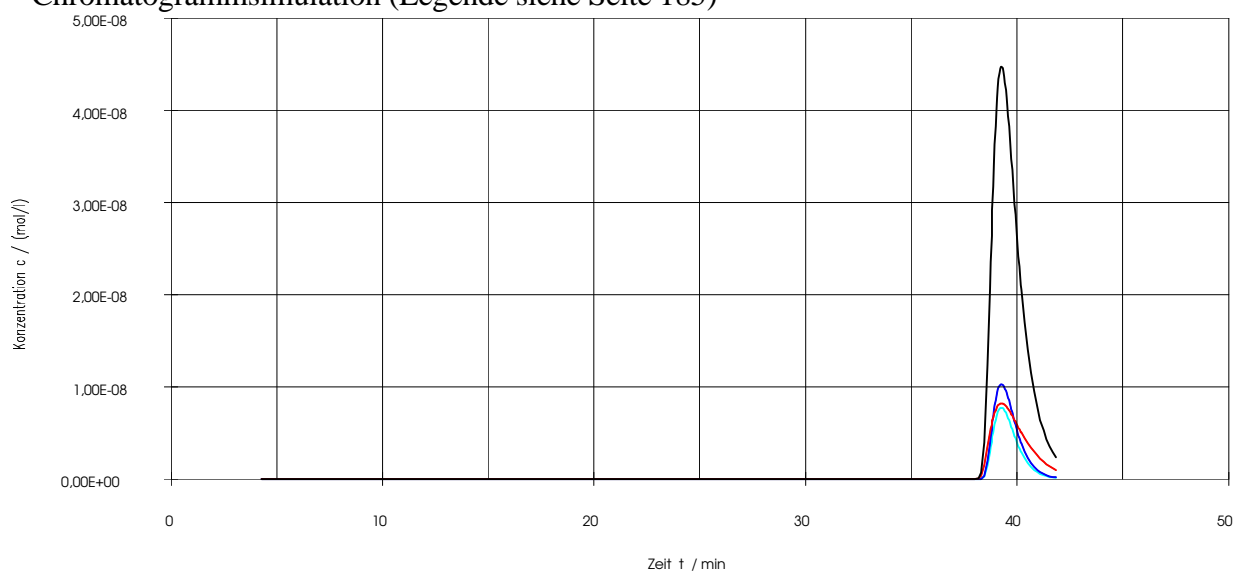


Abb. A29 : N-Benzoyl-alaninbenzylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

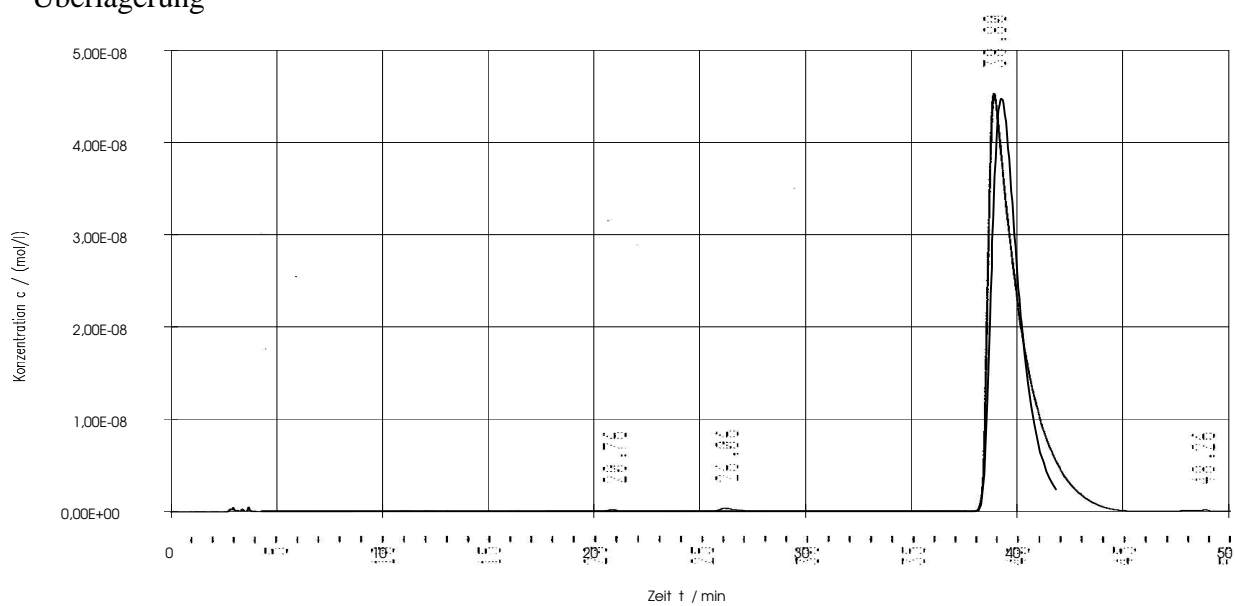
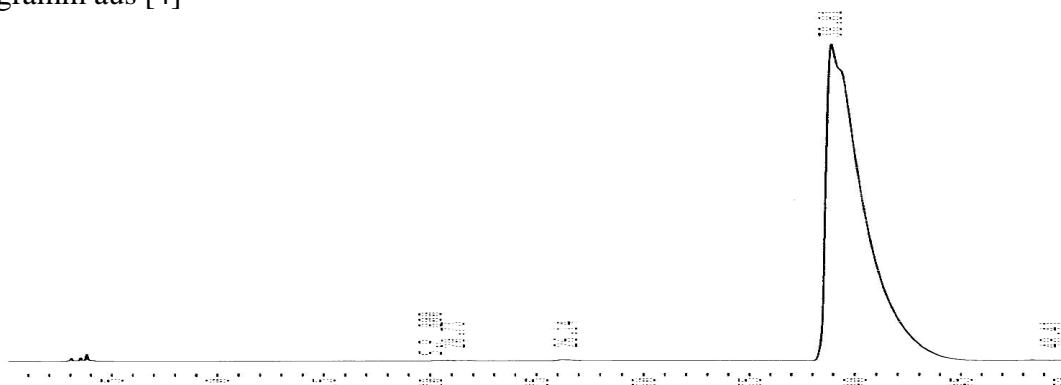
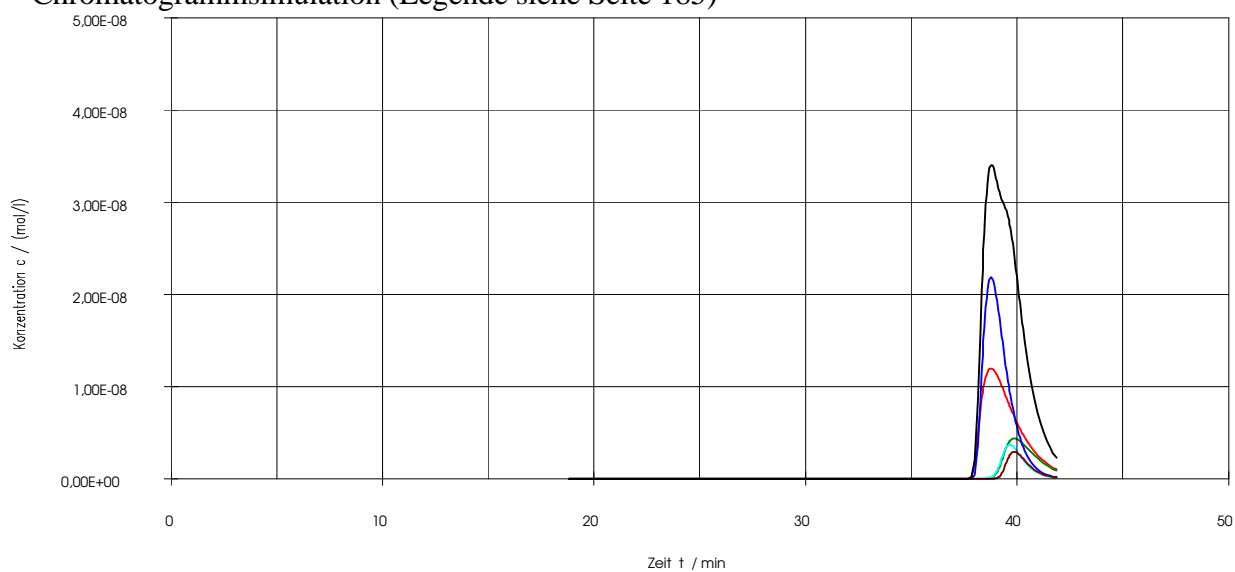


Abb. A30 : N-Benzoyl-alaninbenzylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

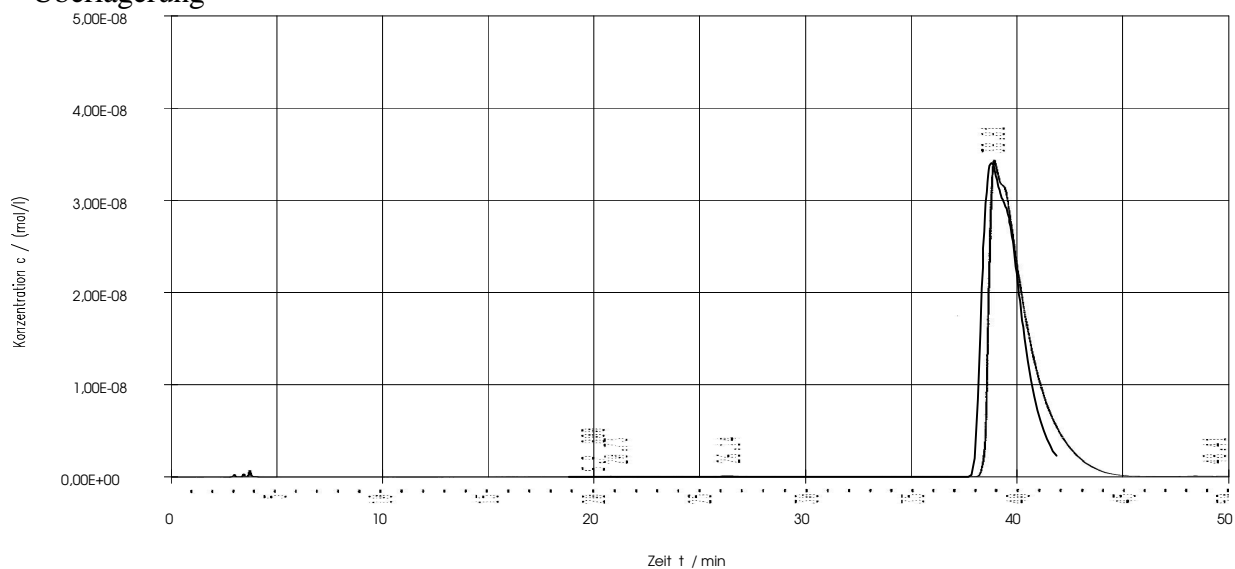
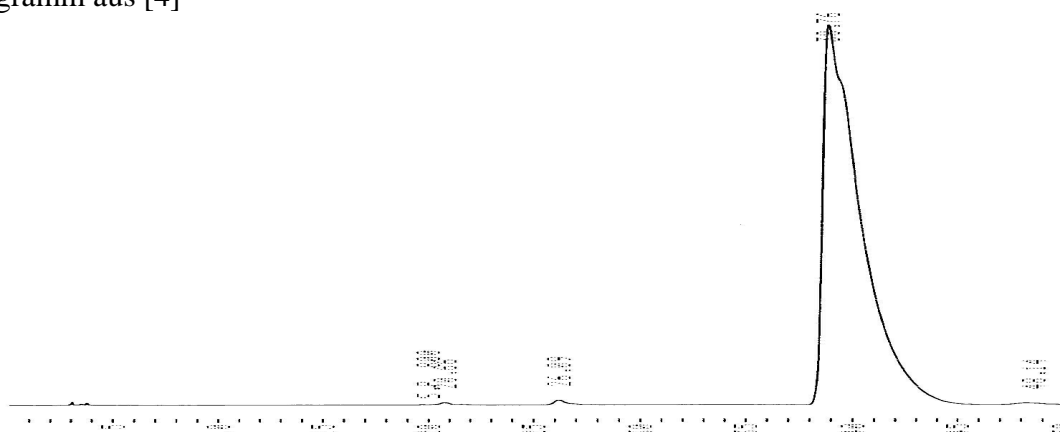
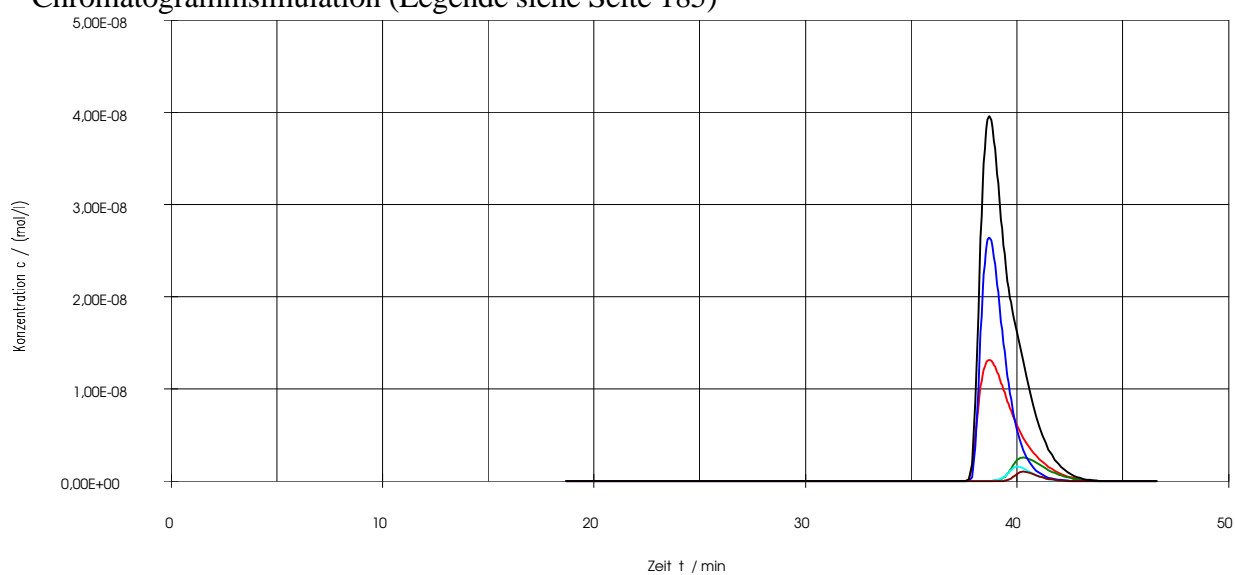




Abb. A31 : N-Benzoyl-alaninbenzylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

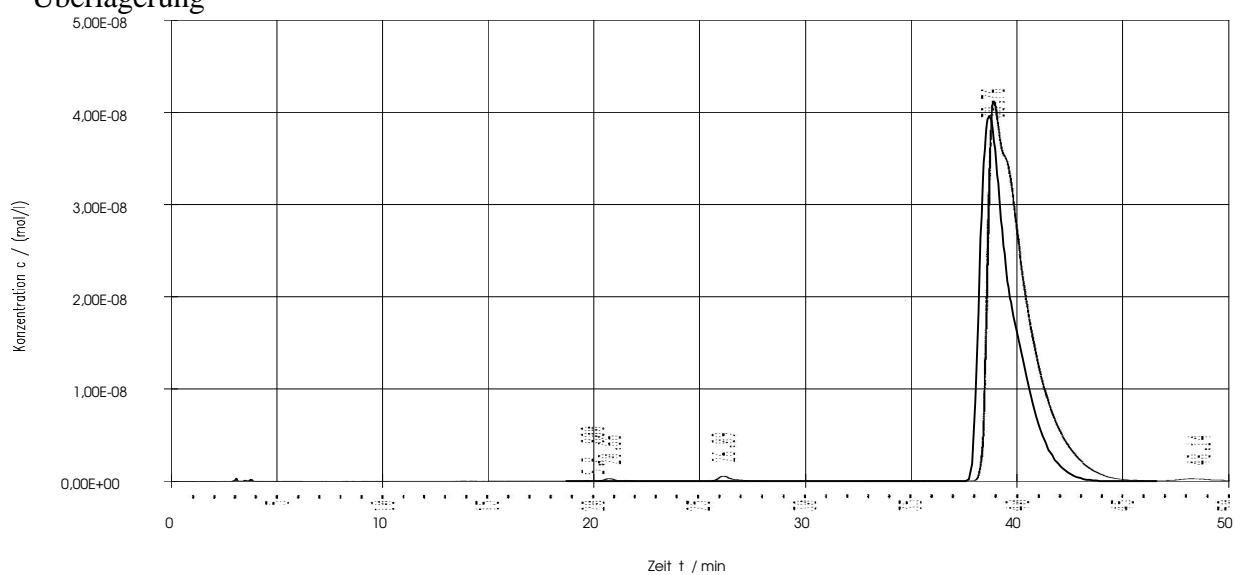
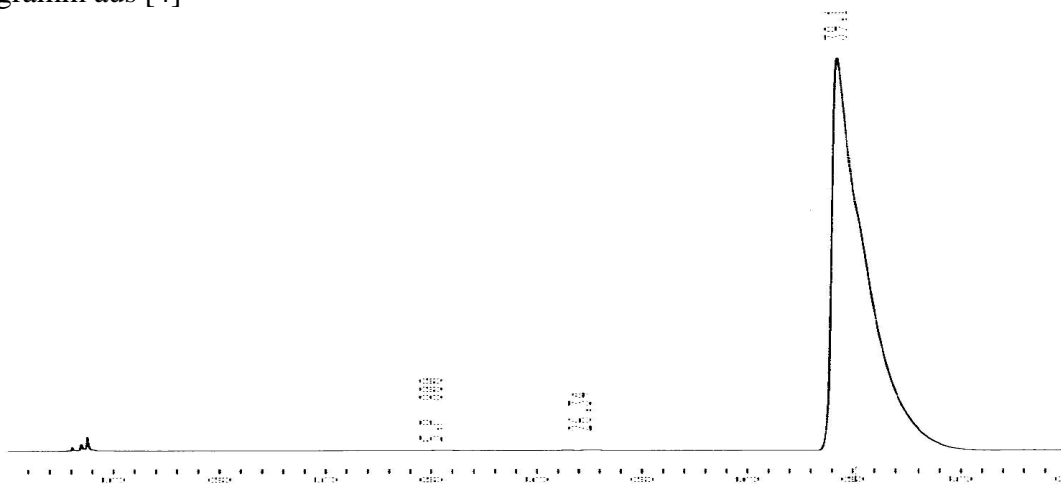
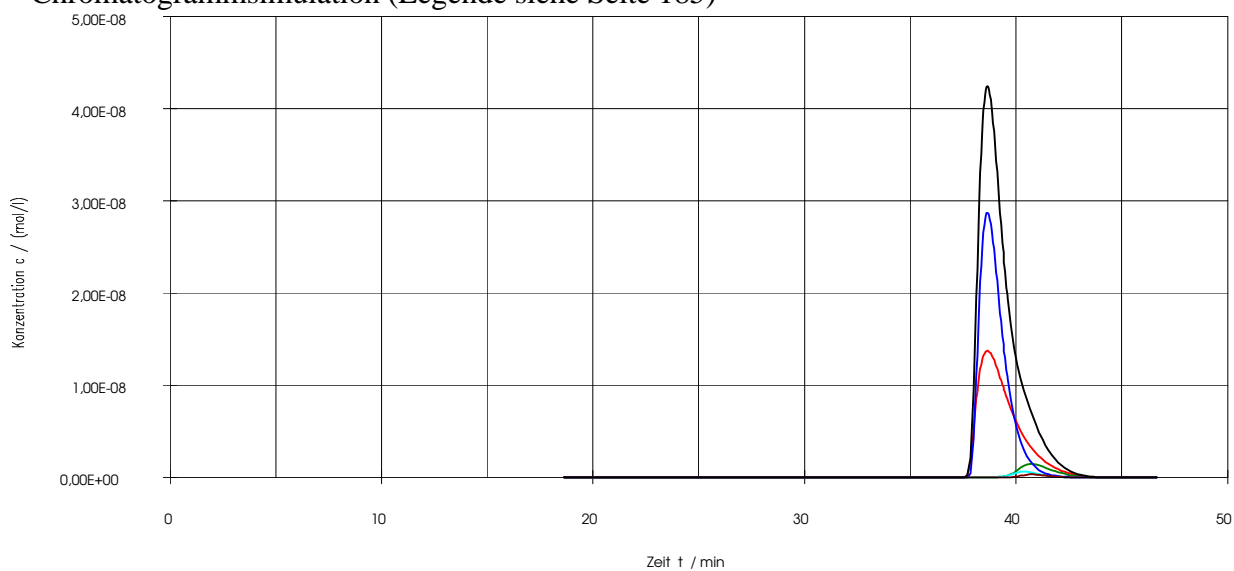


Abb. A32 : N-Benzoyl-alaninbenzylester Aufgabe: 20µg, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

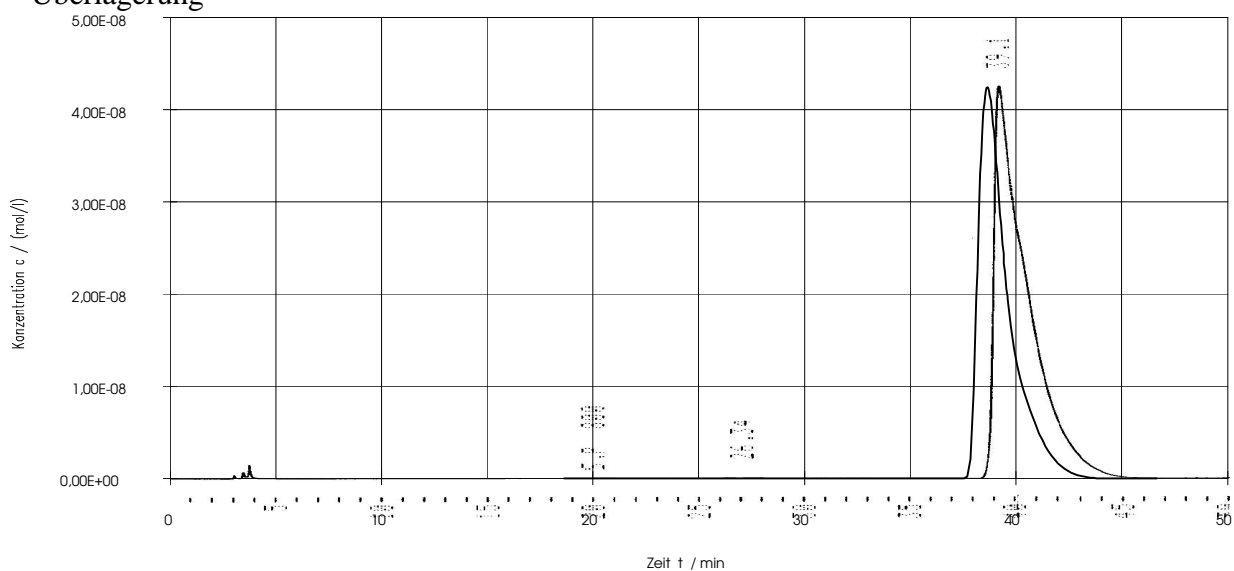
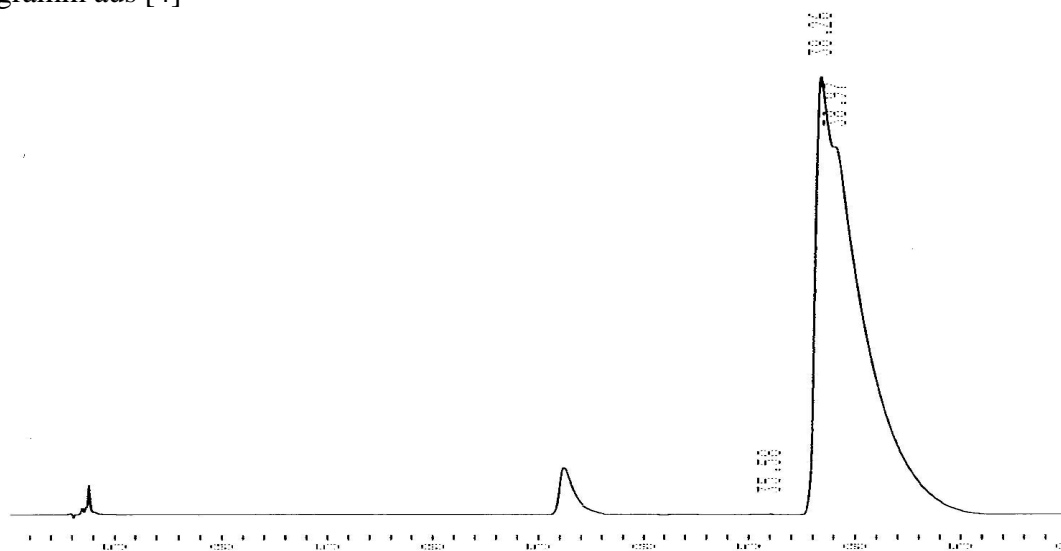
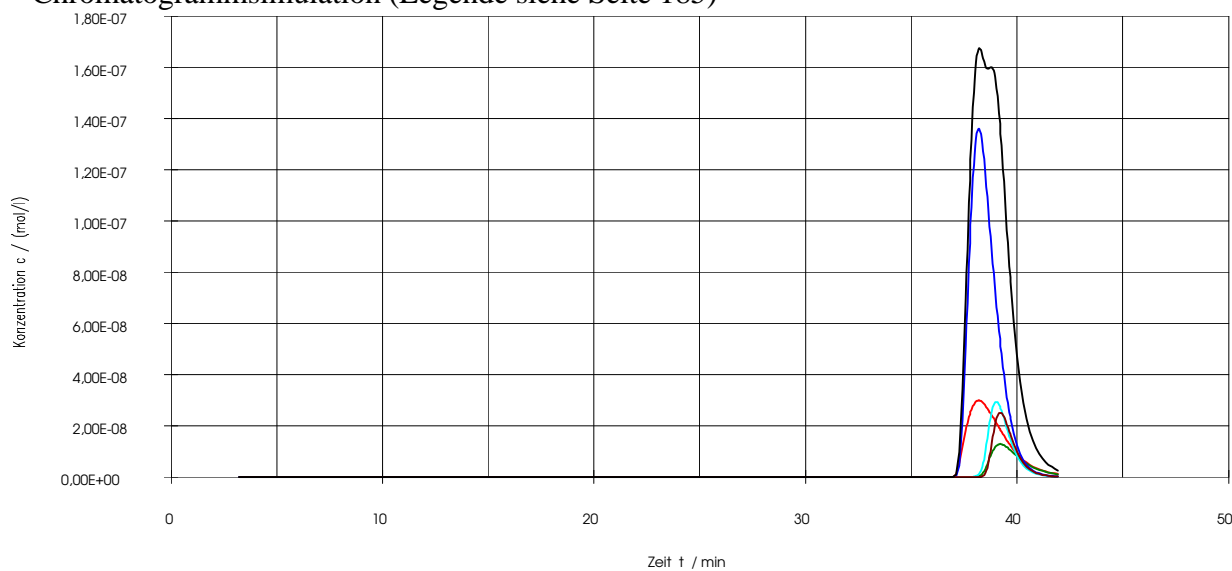


Abb. A33 : N-Benzoyl-alaninbenzylester Aufgabe: 100µg, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

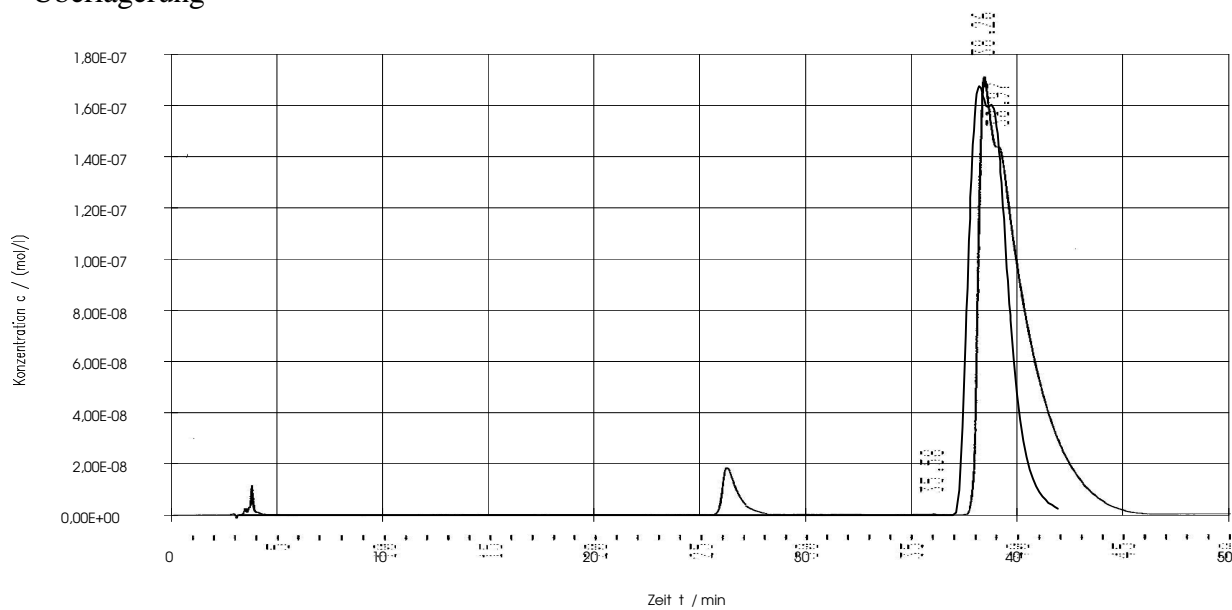
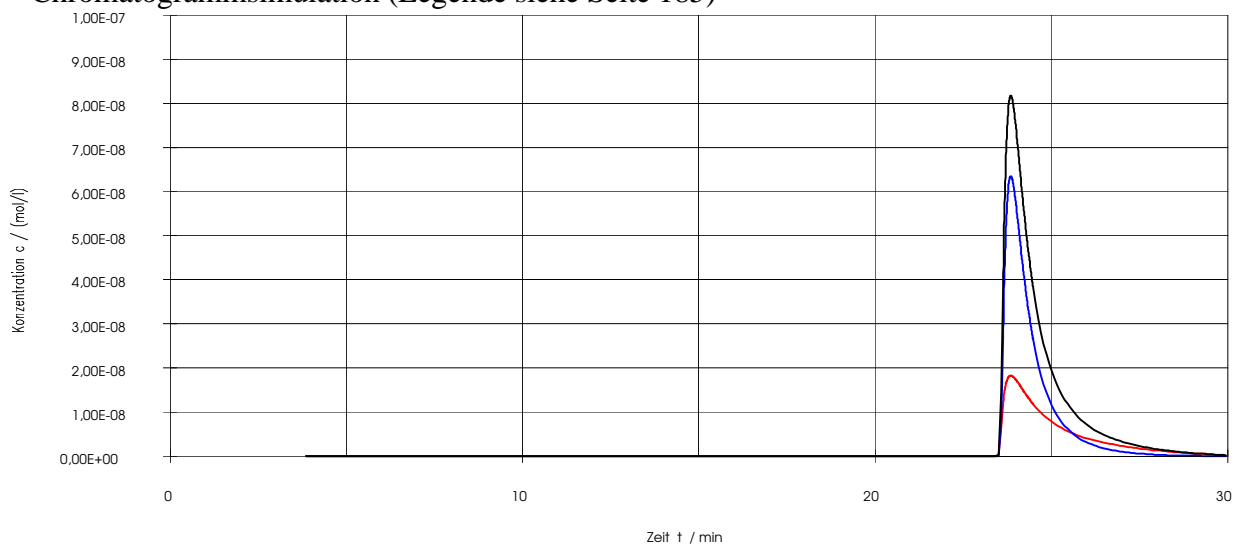


Abb. A34 : N-Benzoyl-alaninethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

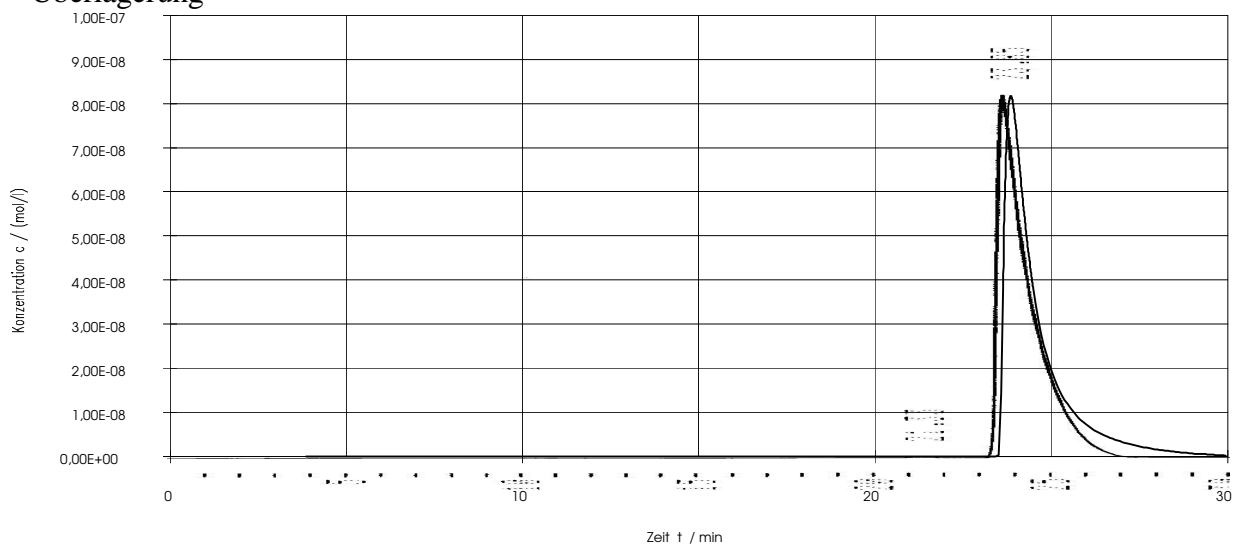
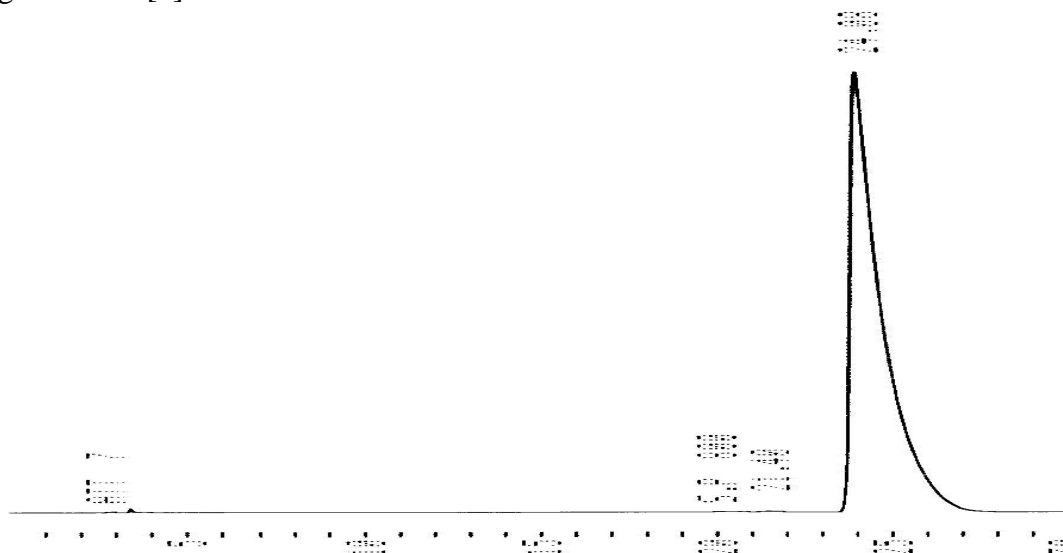
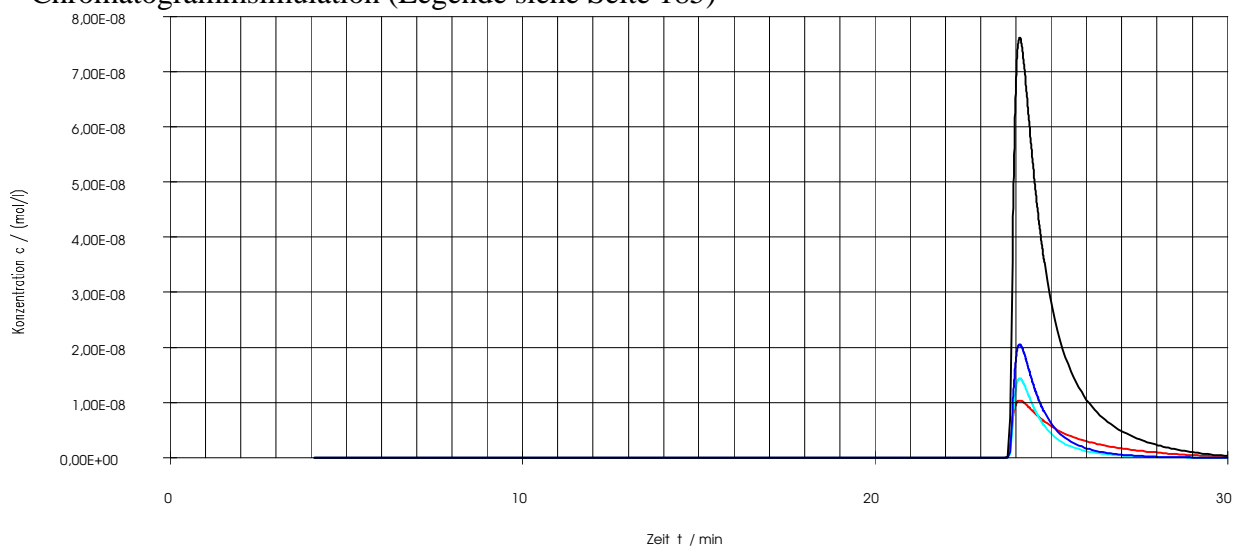


Abb. A35 : N-Benzoyl-alaninethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

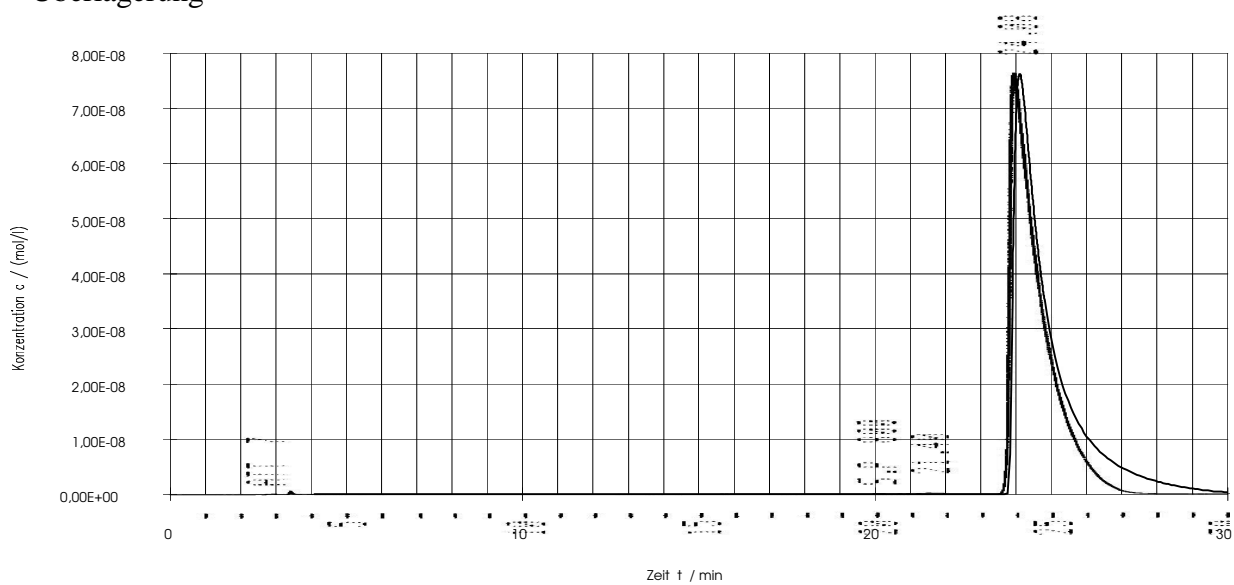
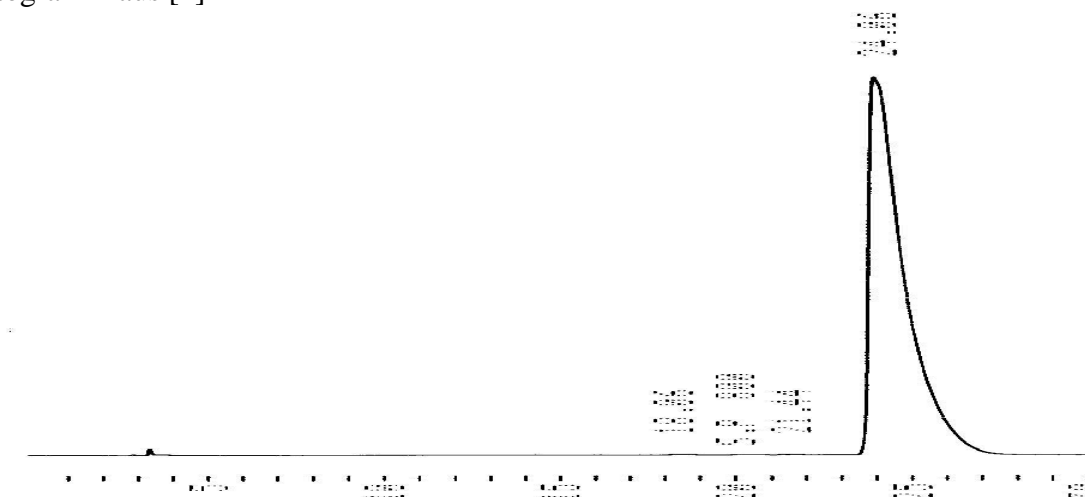
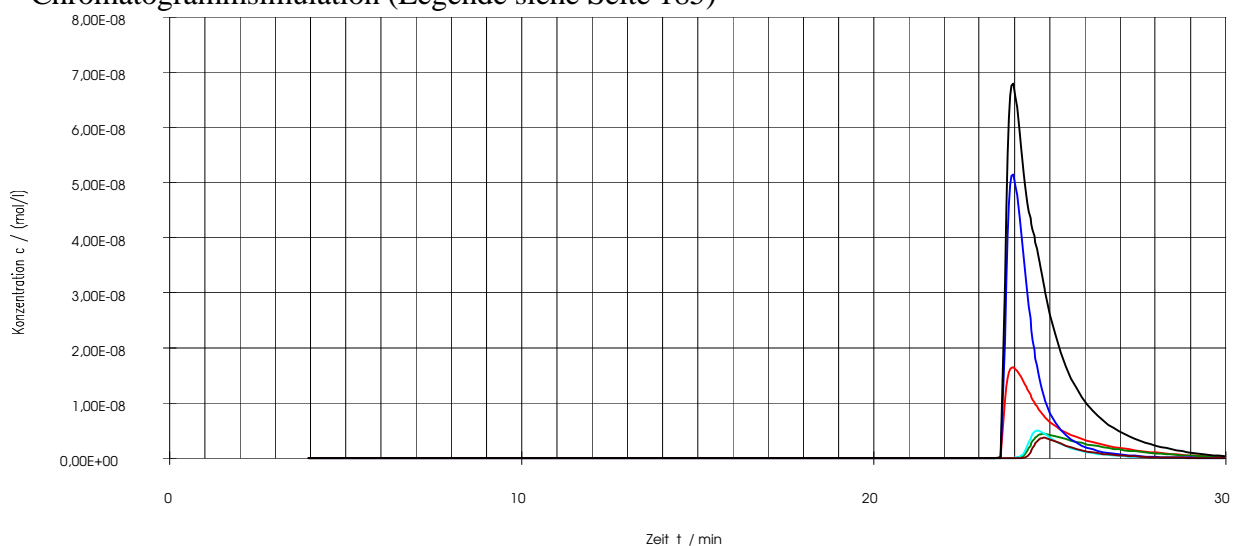


Abb. A36 : N-Benzoyl-alaninethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

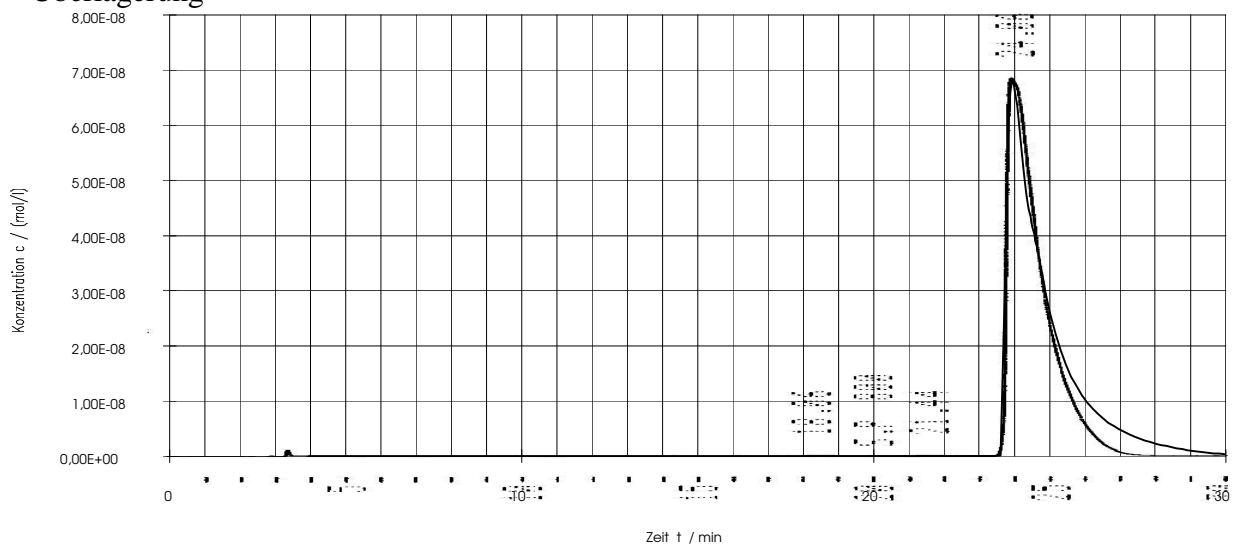
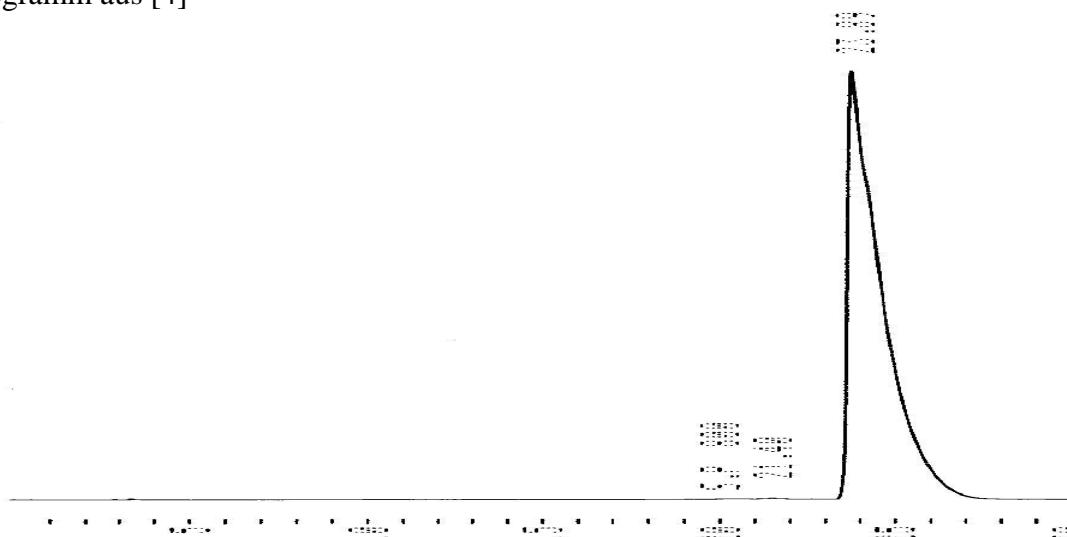
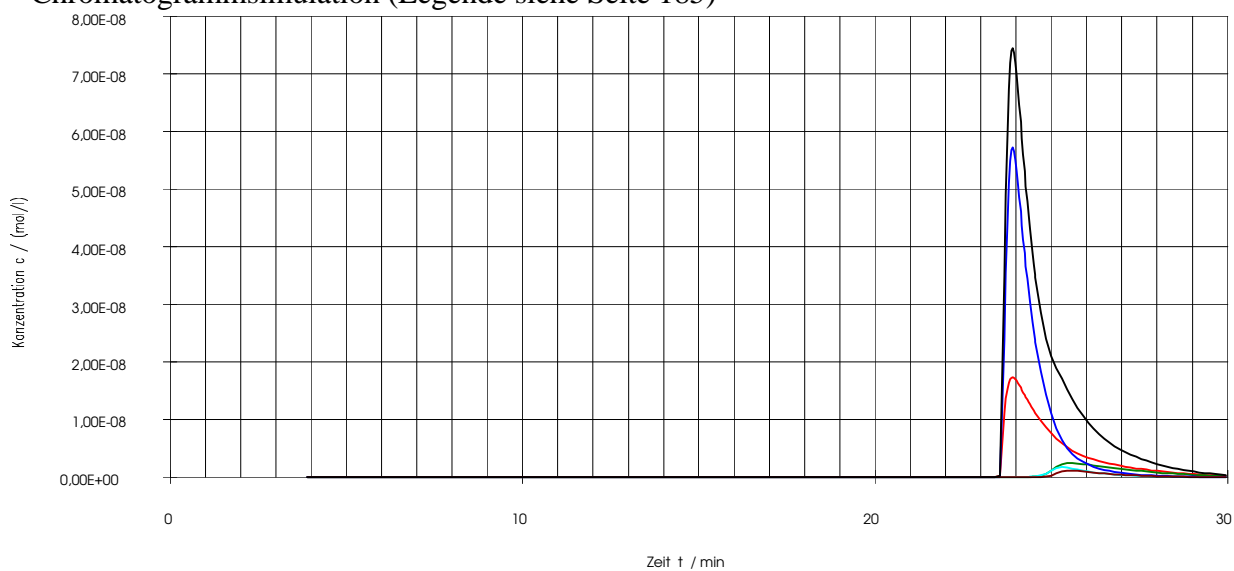


Abb. A37 : N-Benzoyl-alaninethylester Aufgabe: 20µg, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

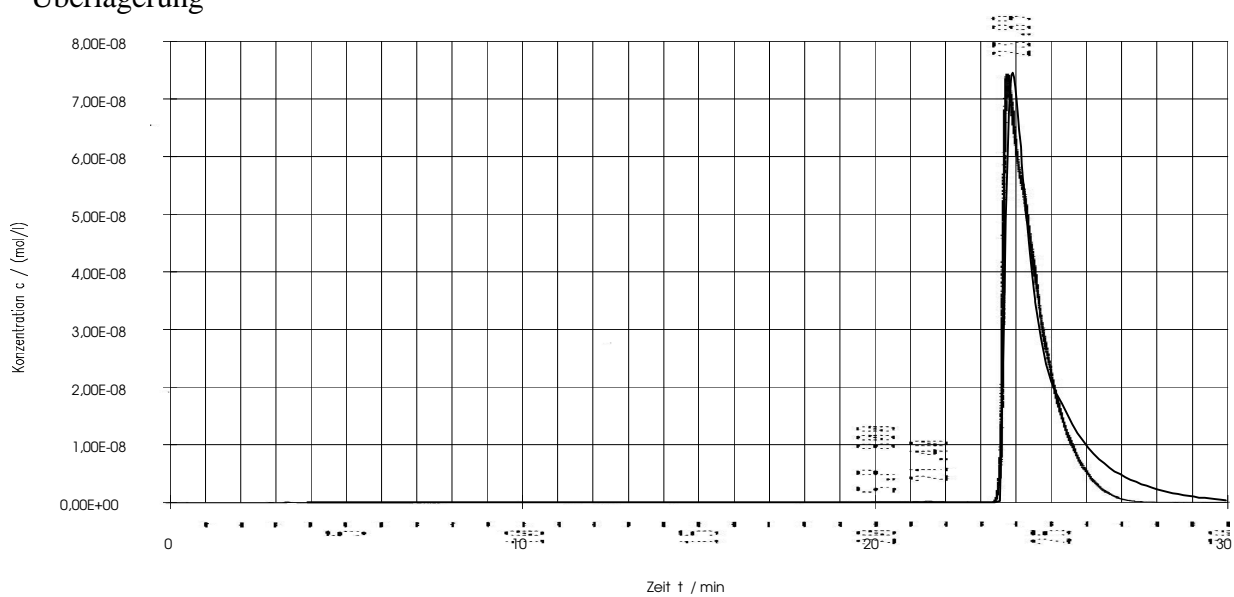
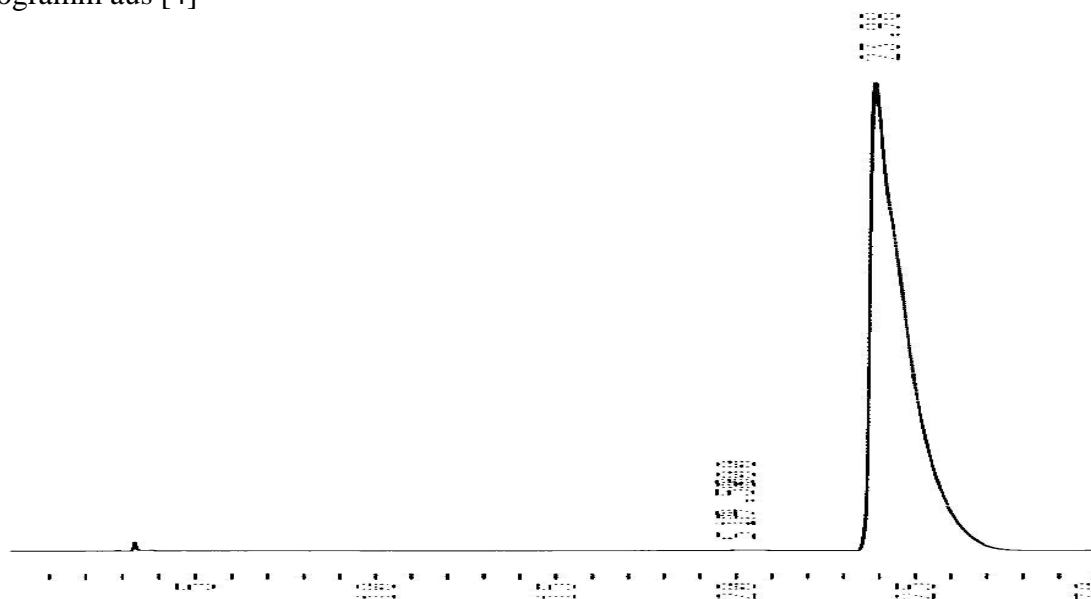
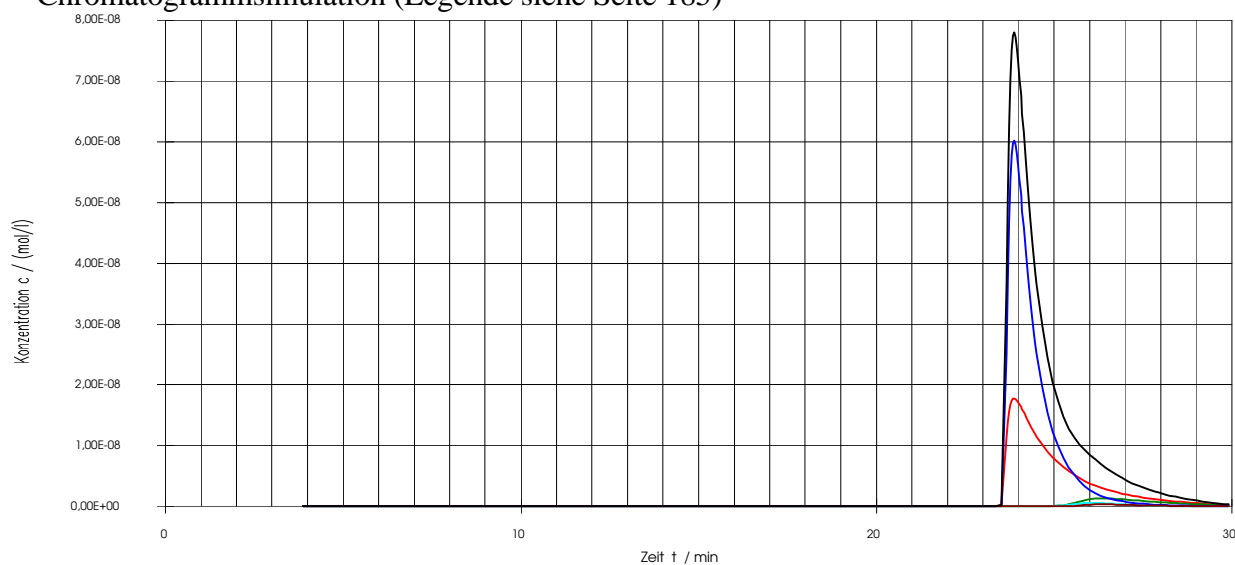


Abb. A38 : N-Benzoyl-alaninethylester Aufgabe: 20µg, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

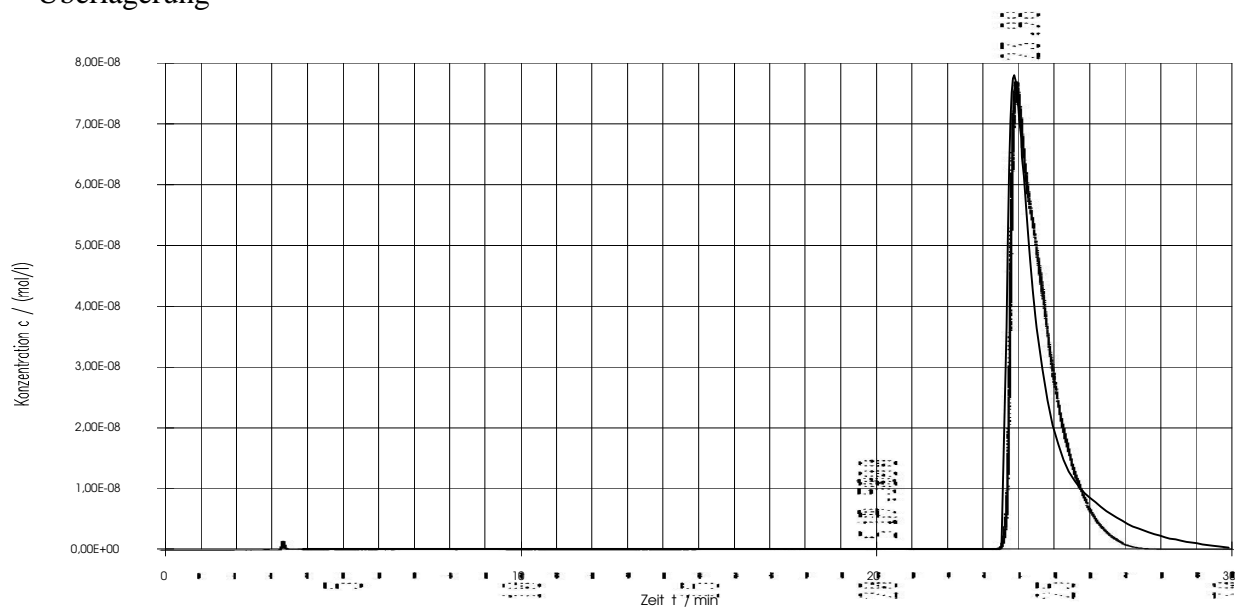
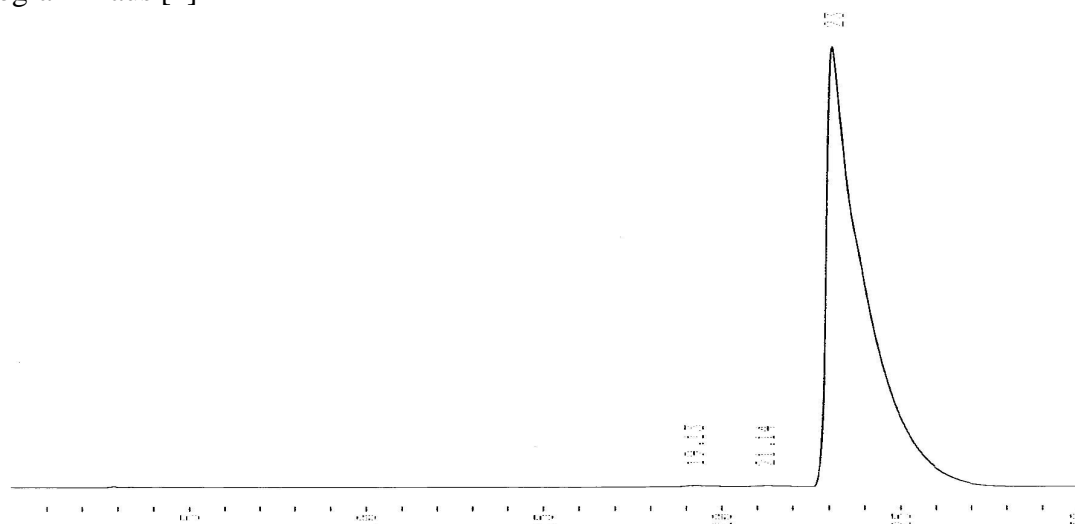
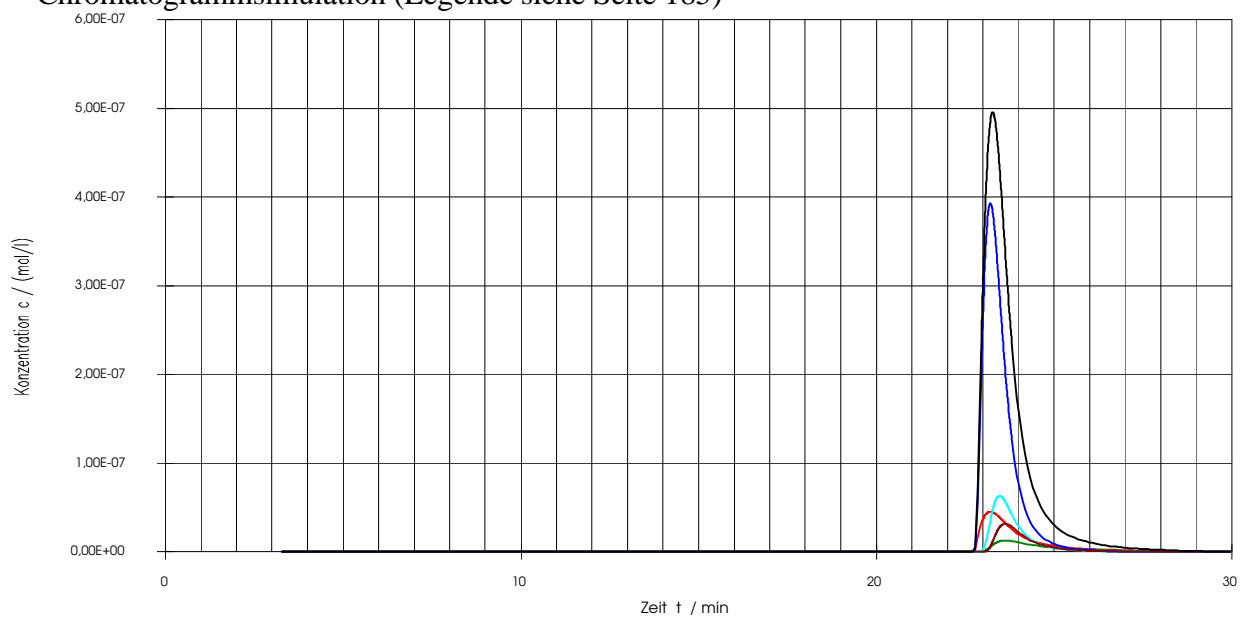




Abb. A39 : N-Benzoyl-alaninethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

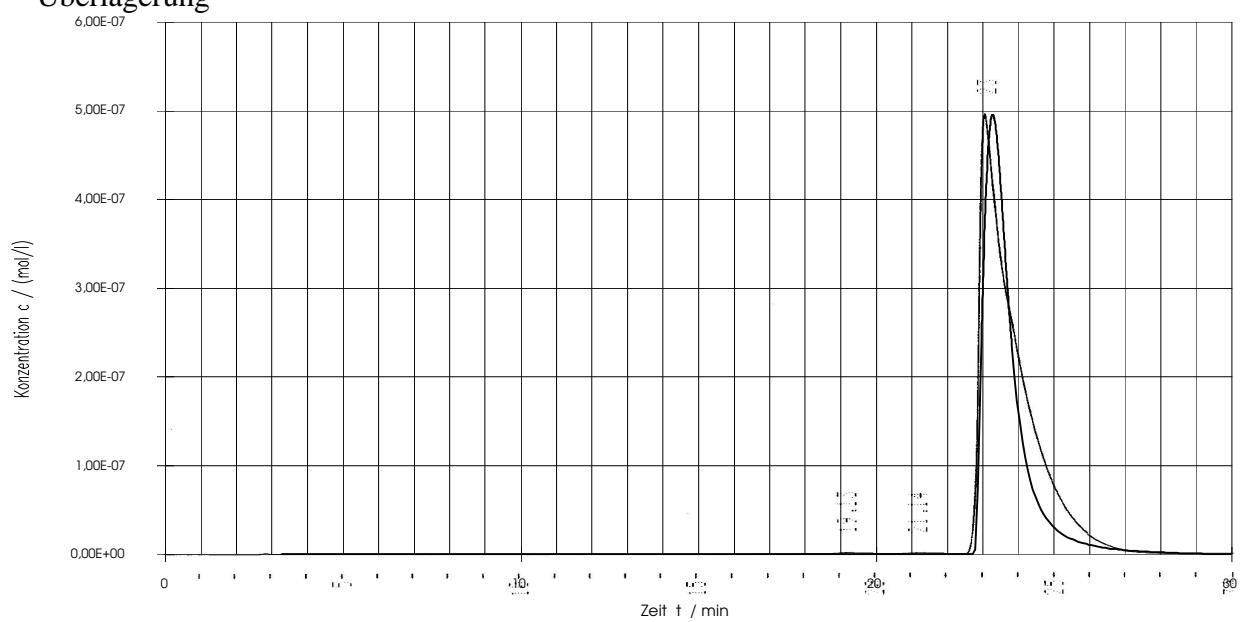
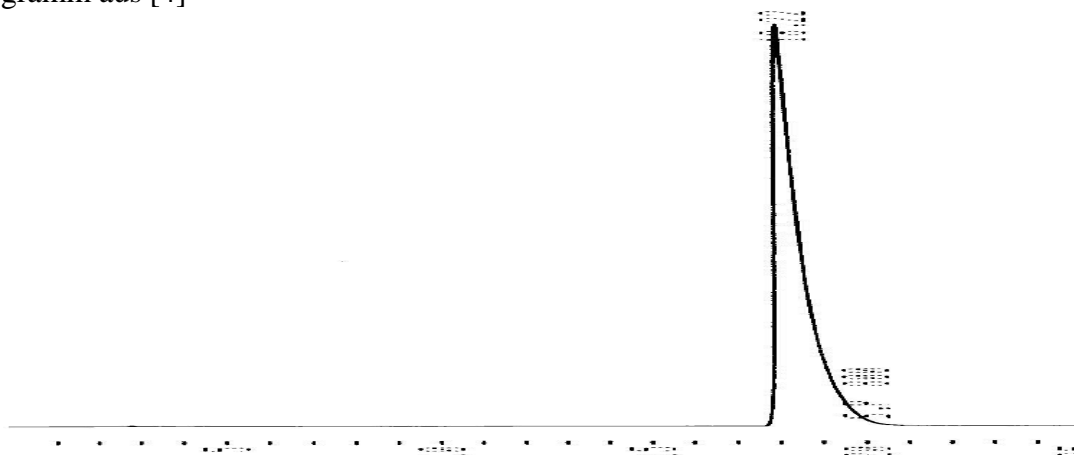
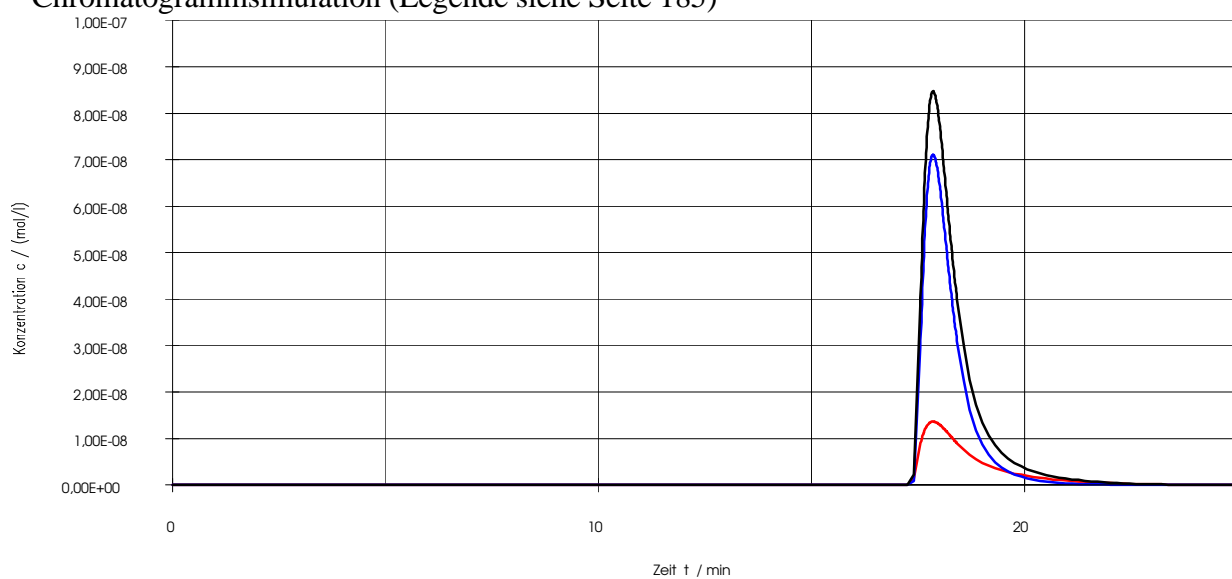


Abb. A40 : N-Benzoyl-alaninisopropylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

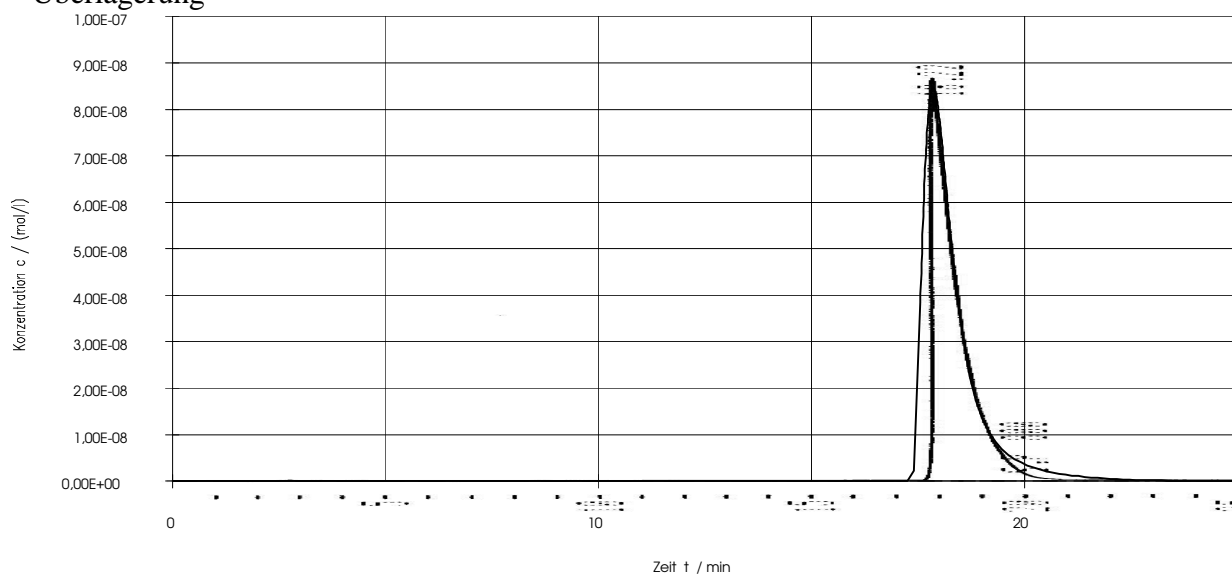
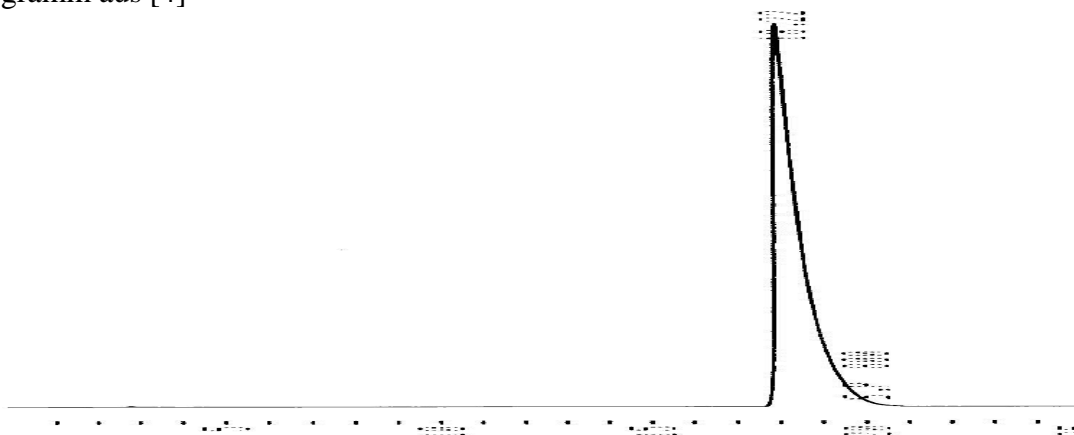
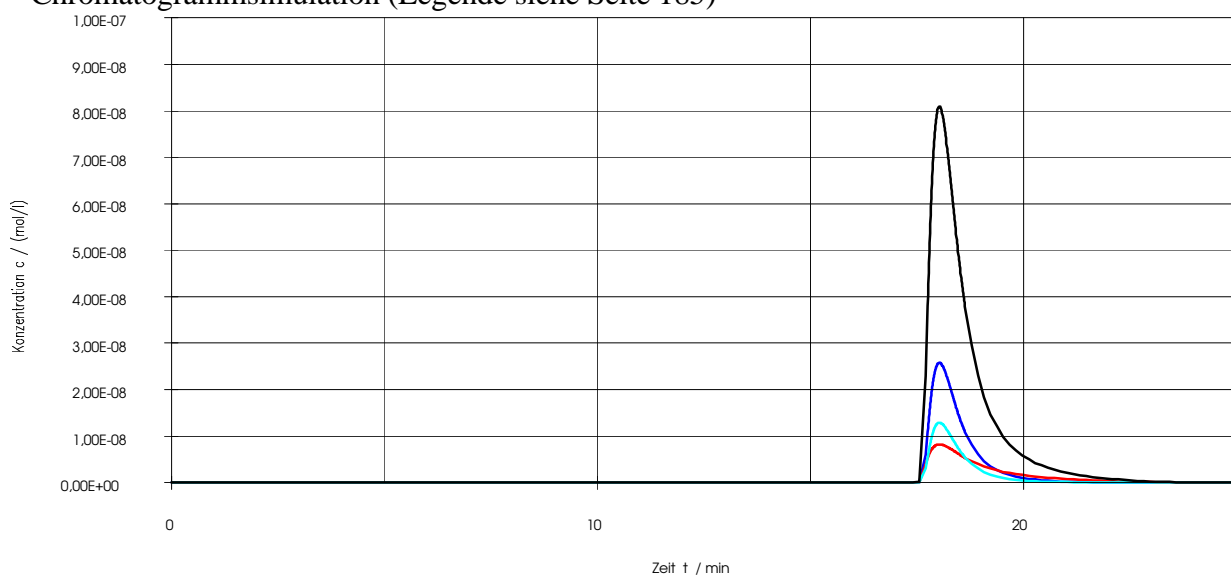


Abb. A41 : N-Benzoyl-alaninisopropylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

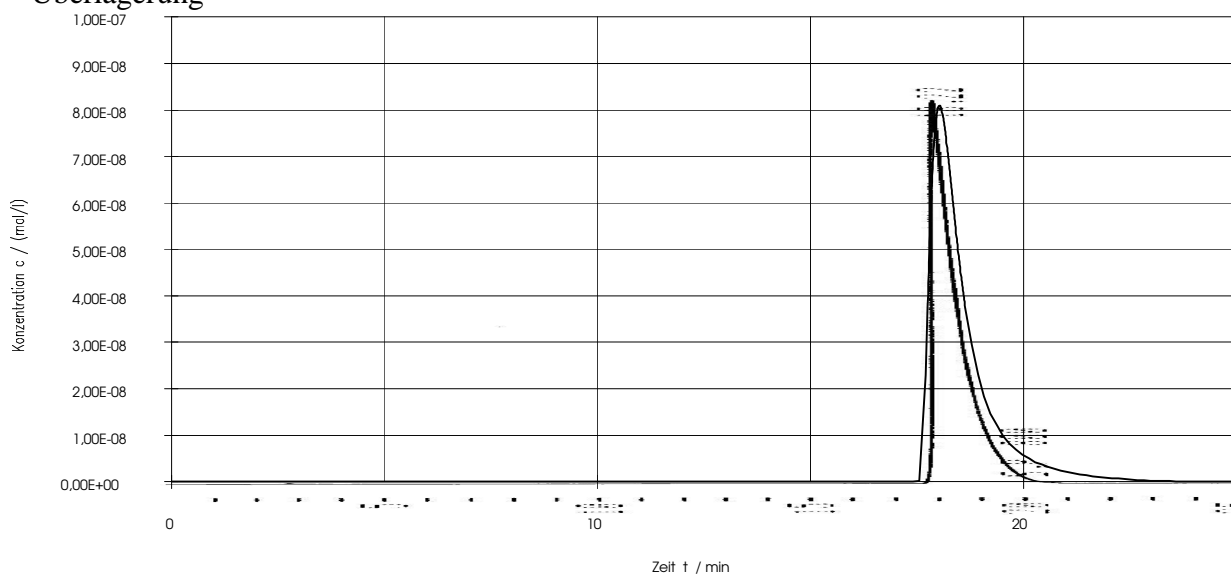
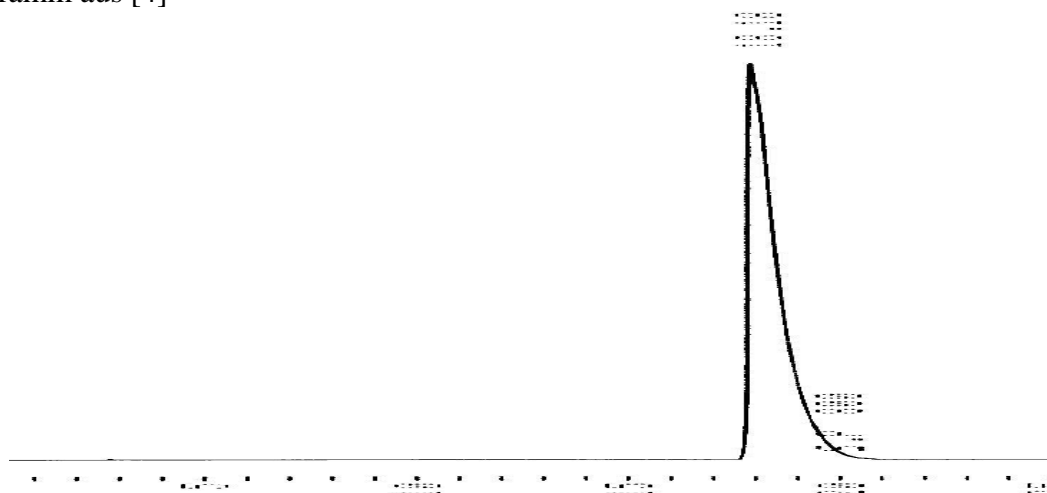
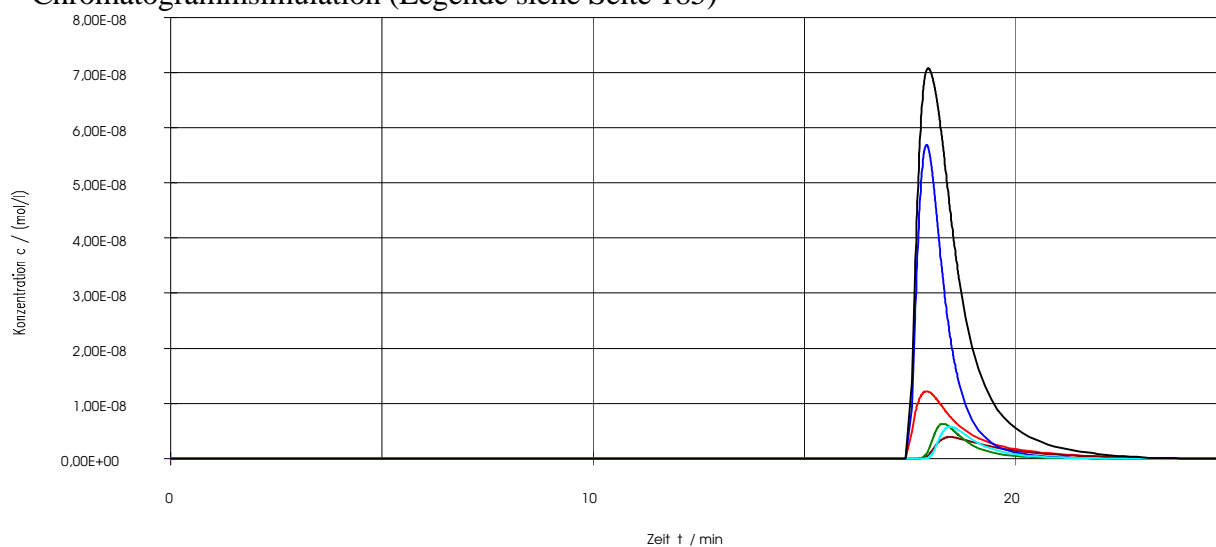


Abb. A42 : N-Benzoyl-alaninisopropylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

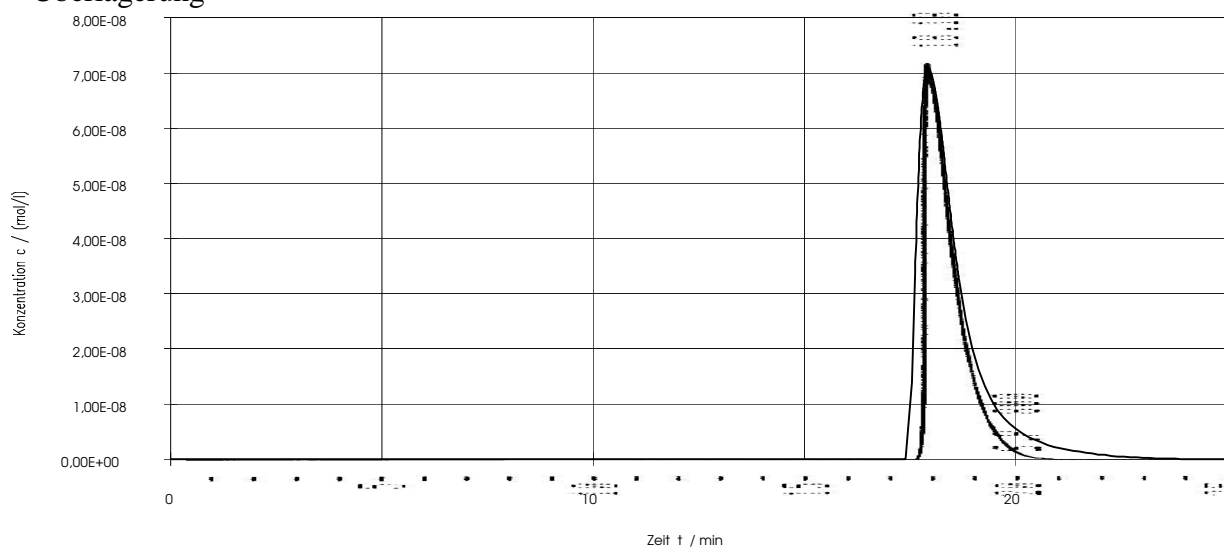
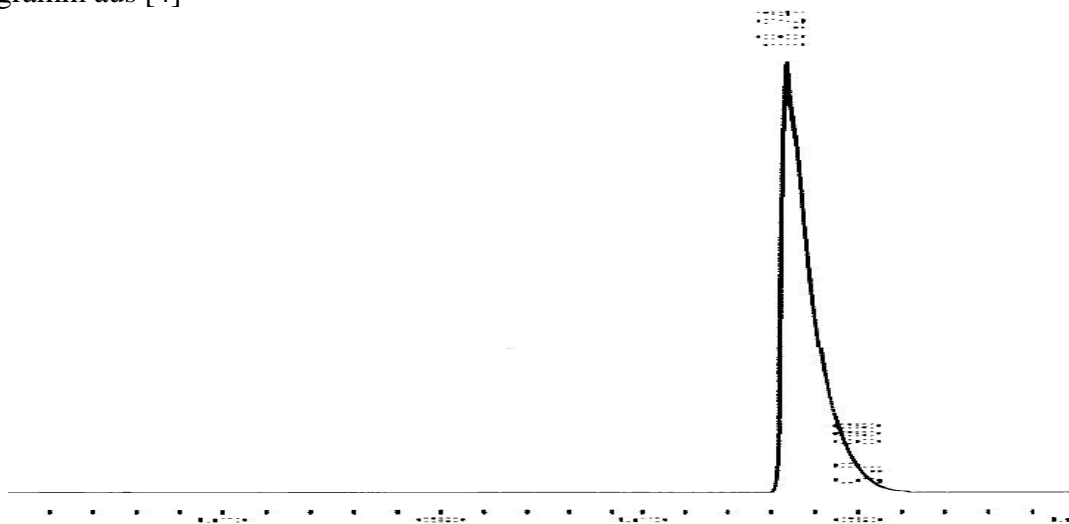
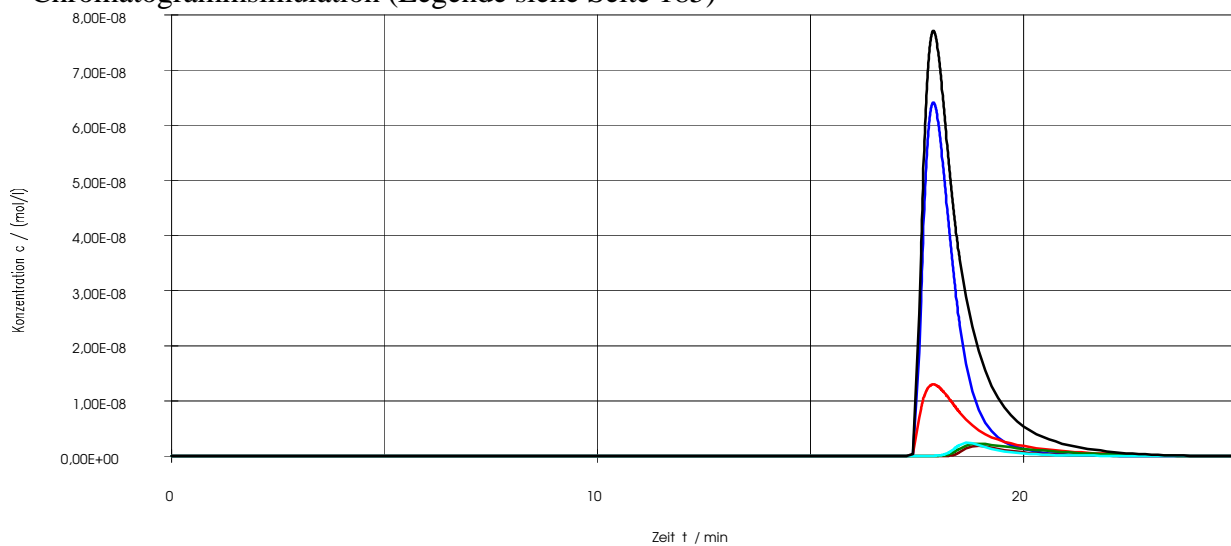


Abb. A43 : N-Benzoyl-alaninisopropylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

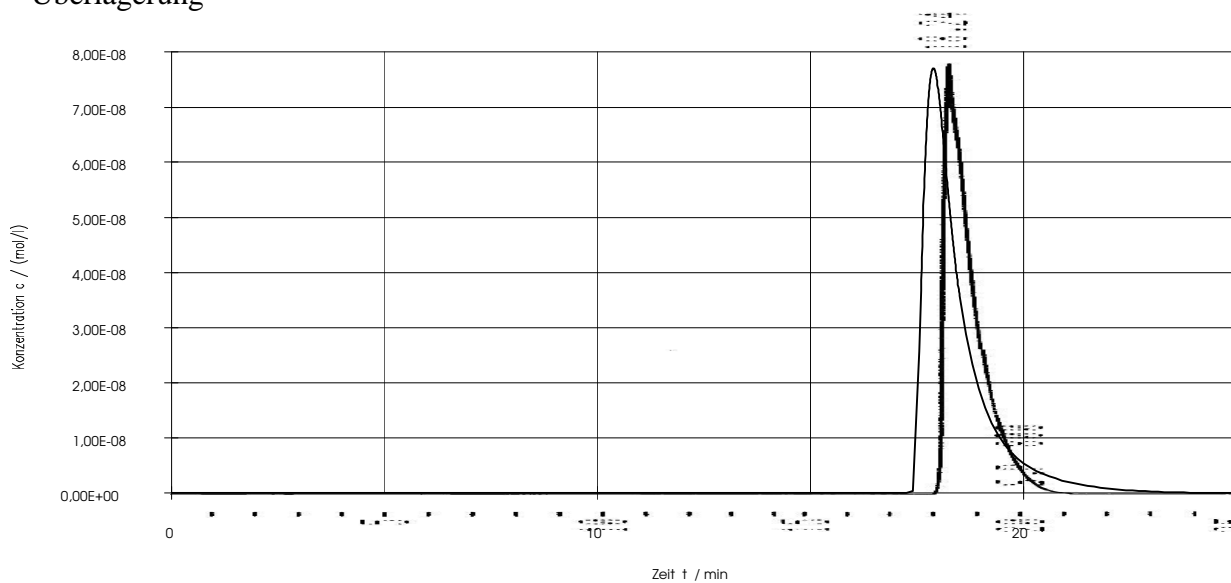
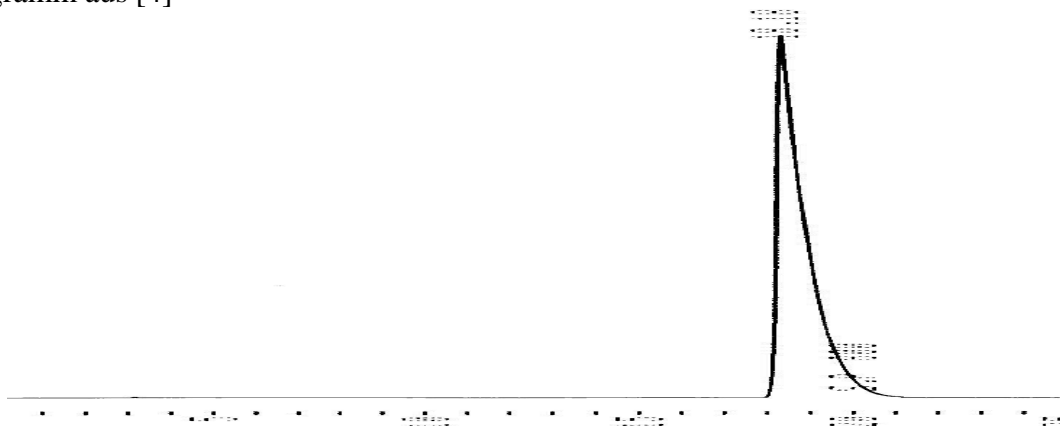
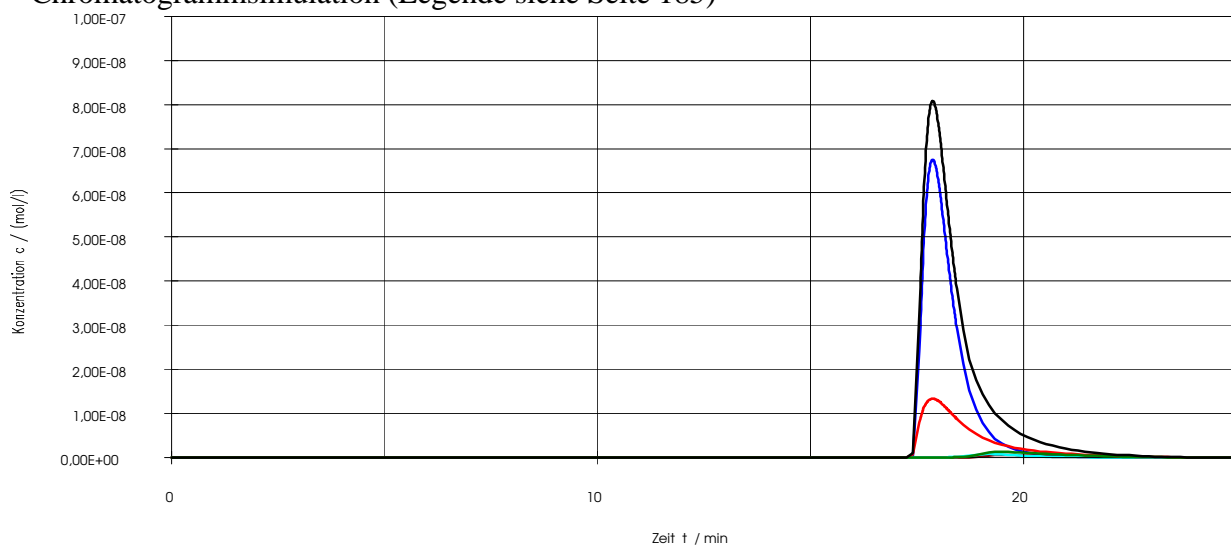


Abb. A44 : N-Benzoyl-alaninisopropylester Aufgabe: 20µg, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

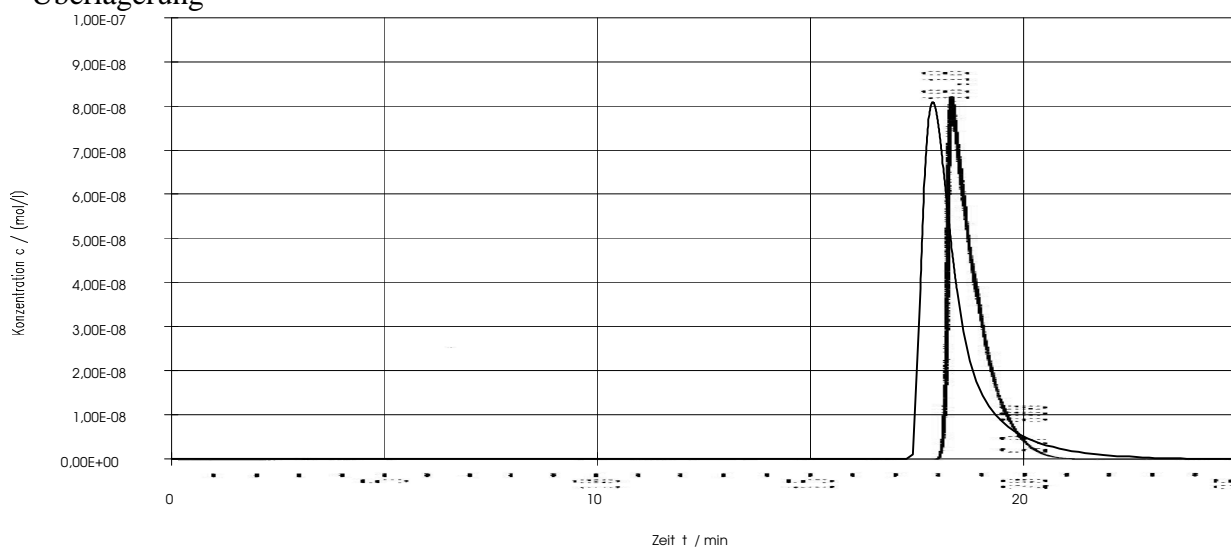
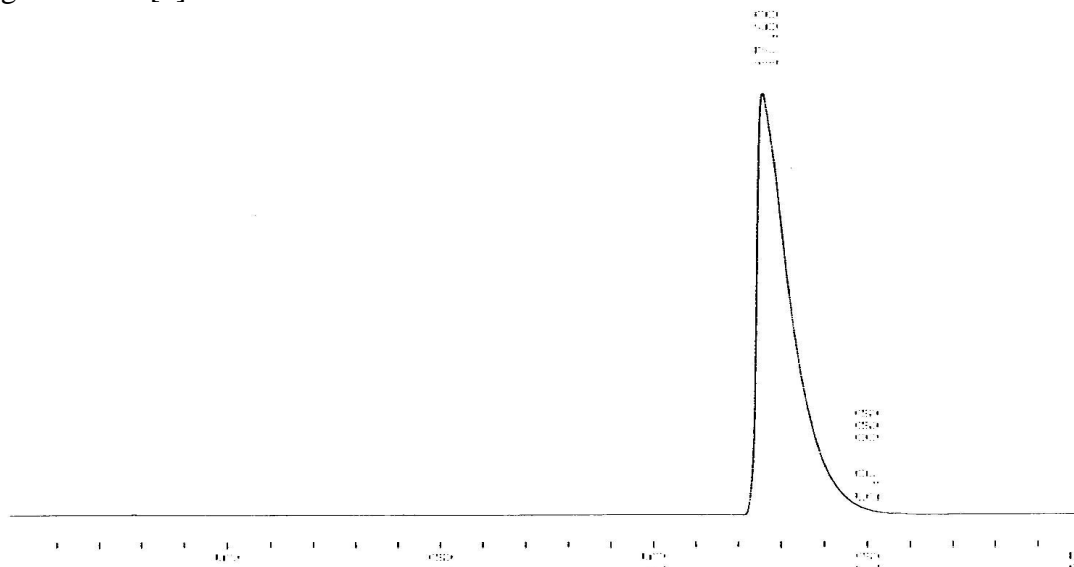
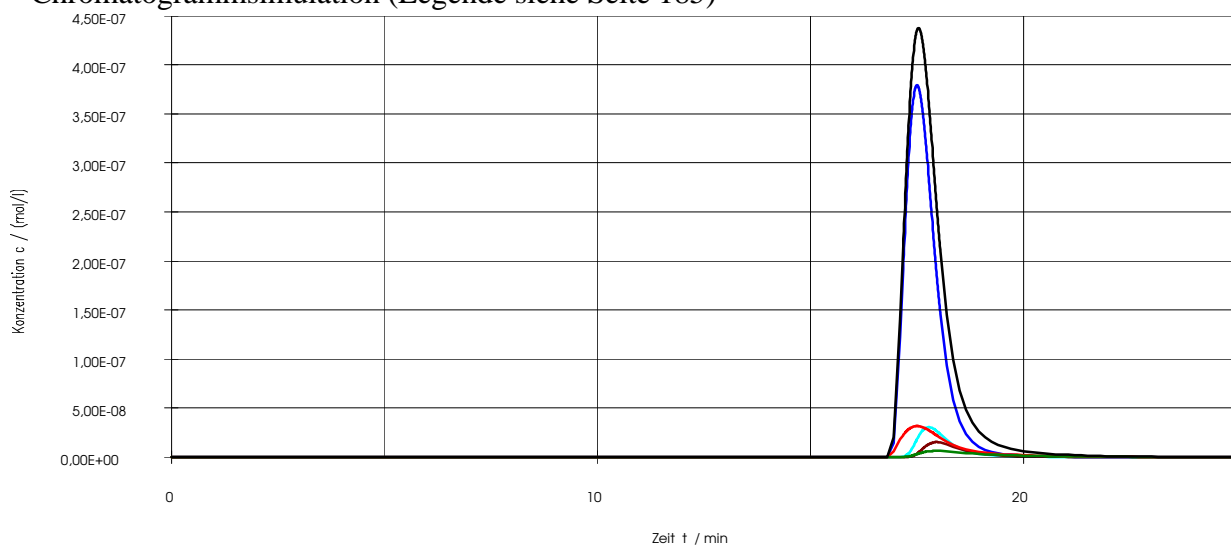


Abb. A45 : N-Benzoyl-alaninisopropylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

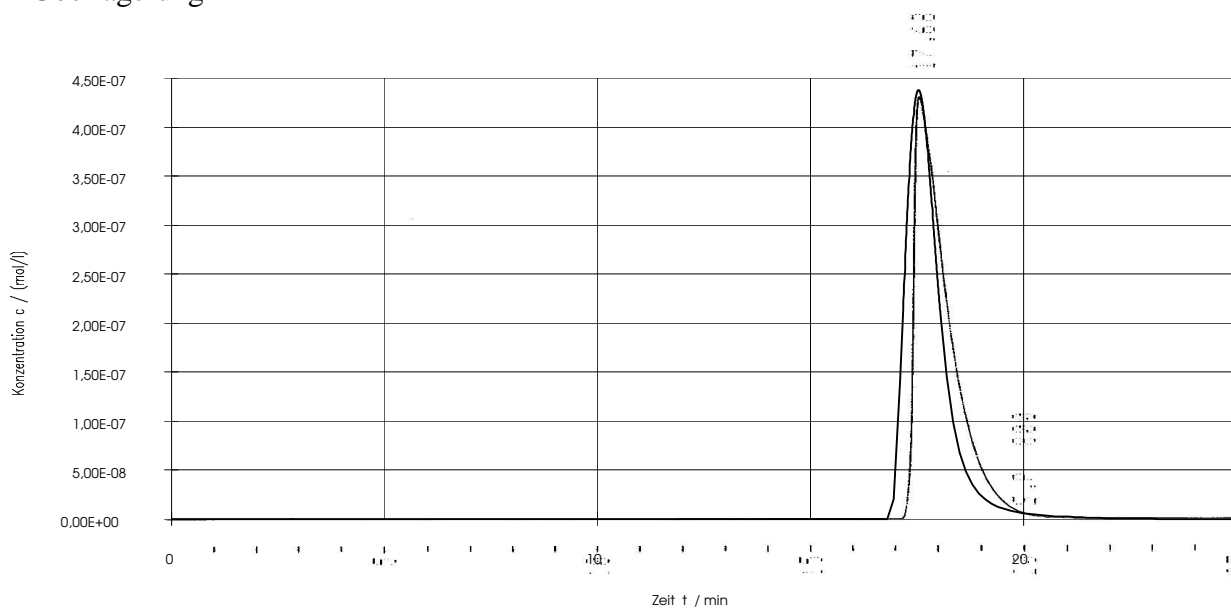
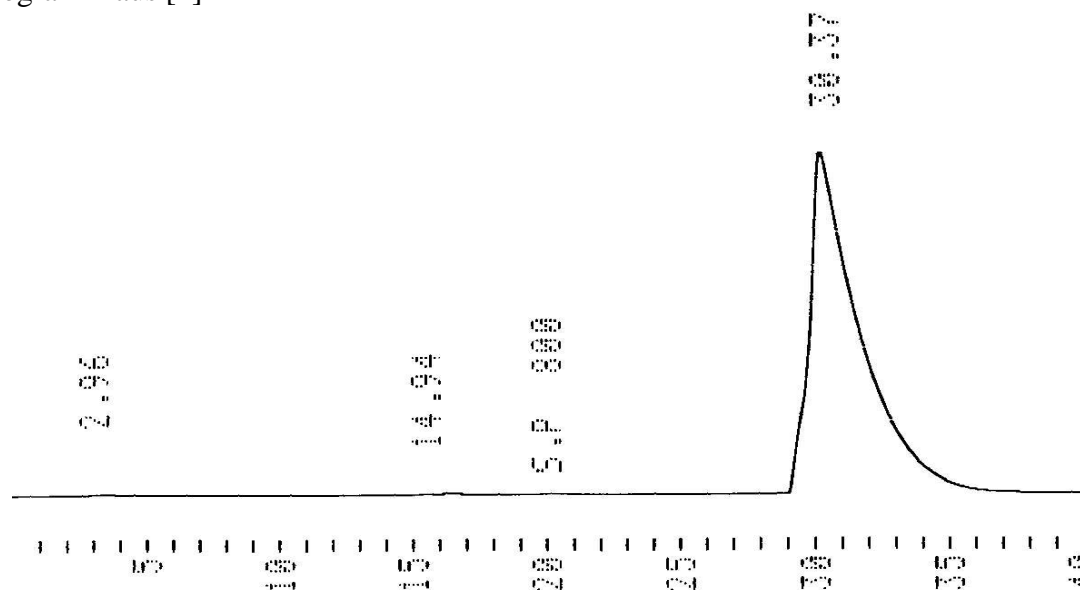
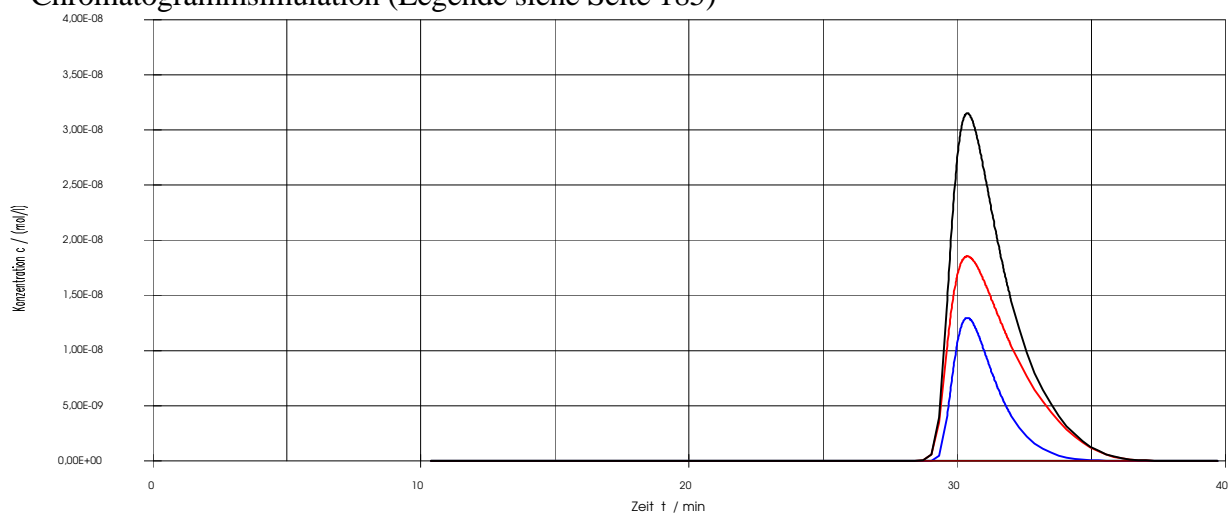


Abb. A46 : N-Benzoyl-leucinmethylester Aufgabe: 20µg, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

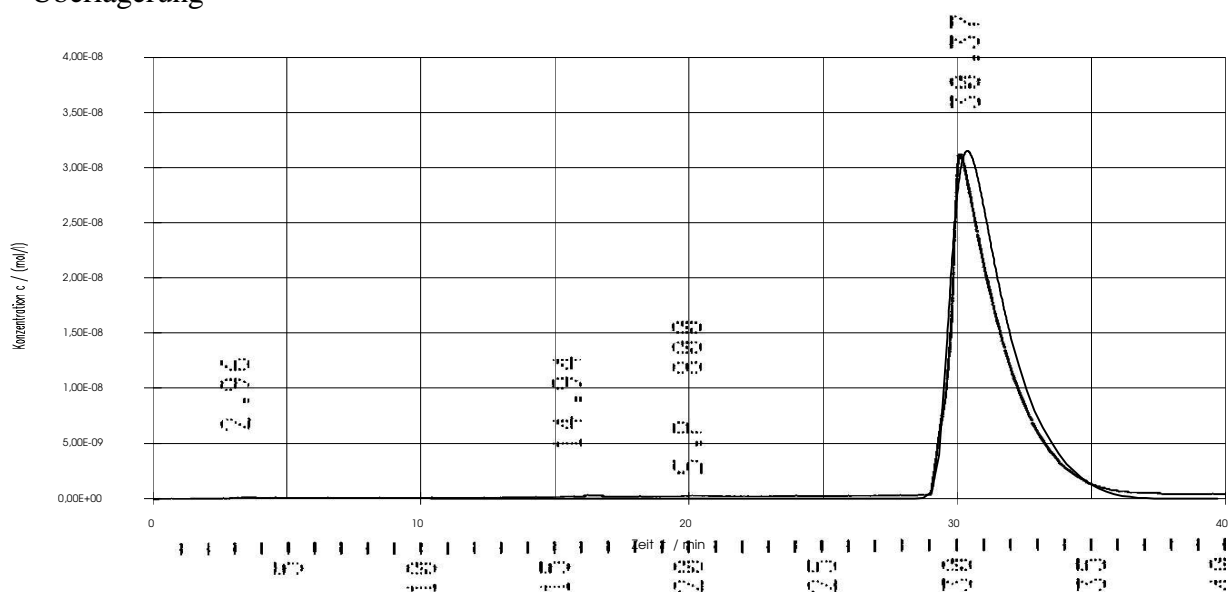
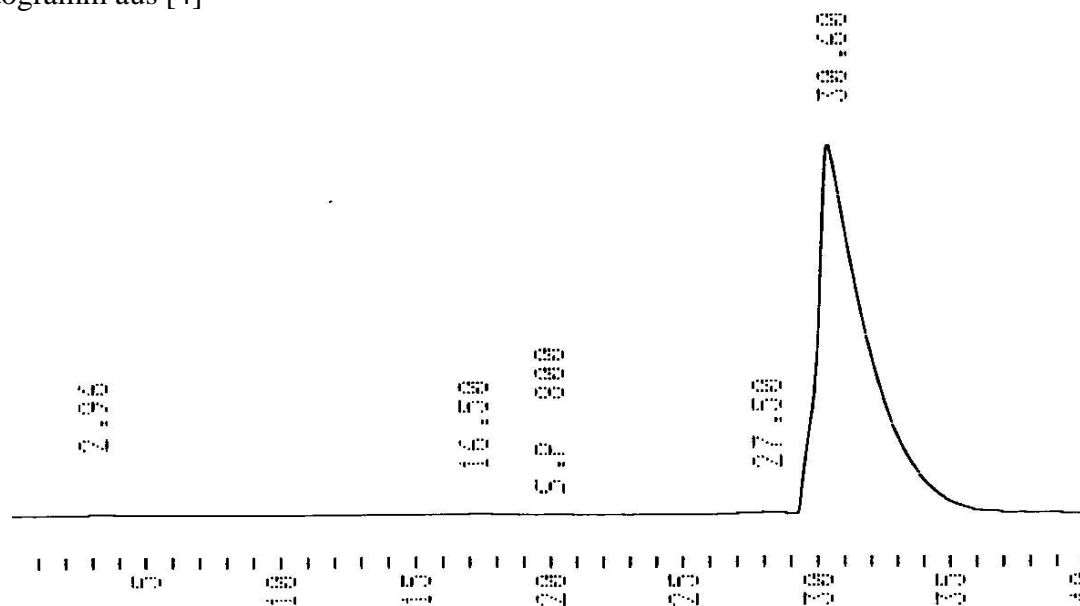
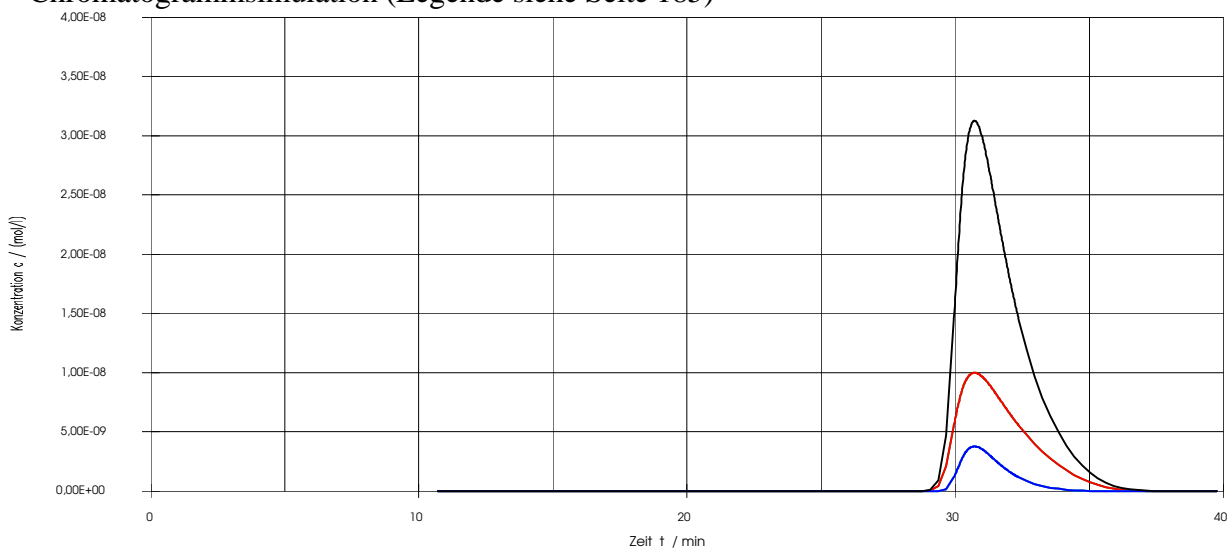




Abb. A47 : N-Benzoyl-leucinmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

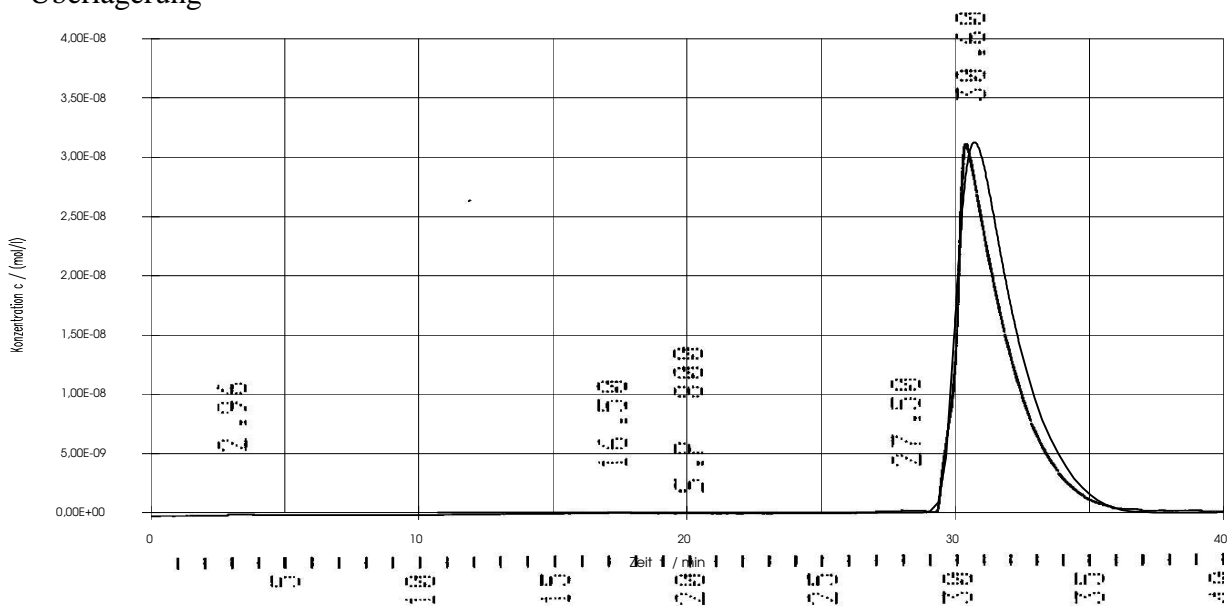
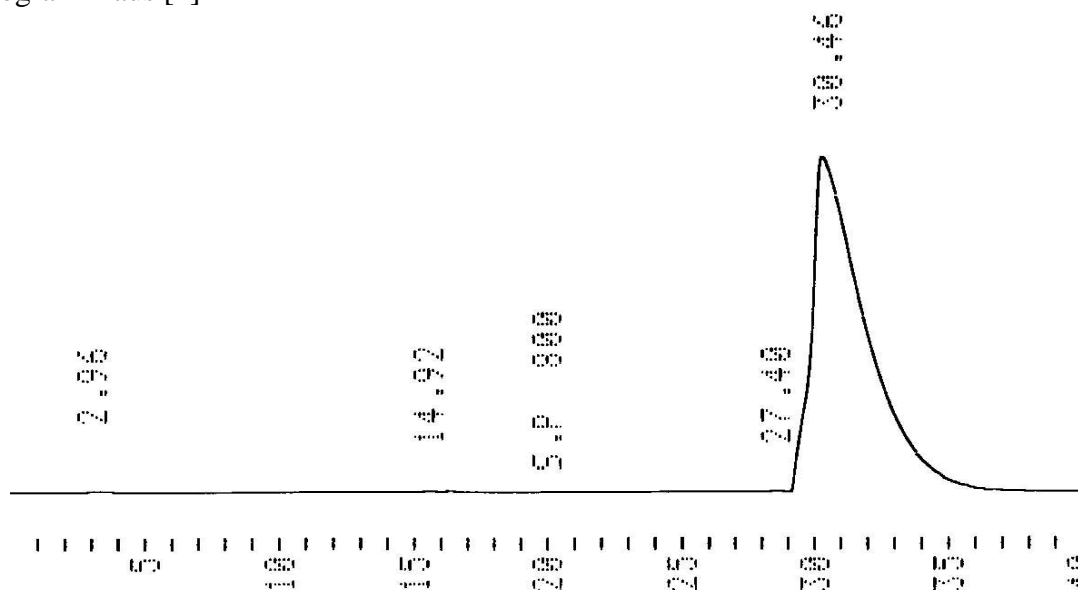
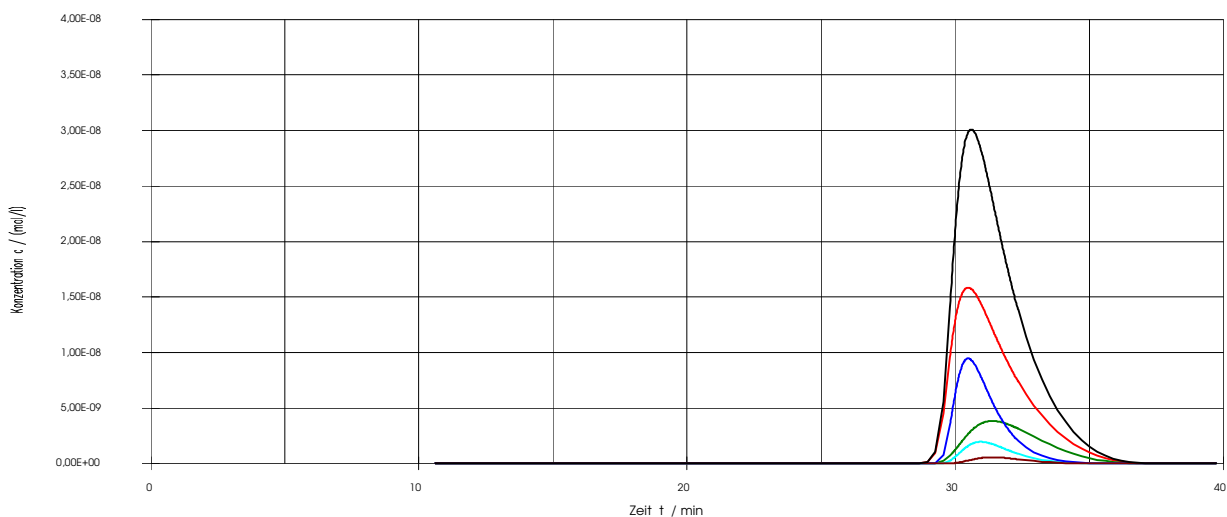


Abb. A48 : N-Benzoyl-leucinmethylester Aufgabe: 20µg, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

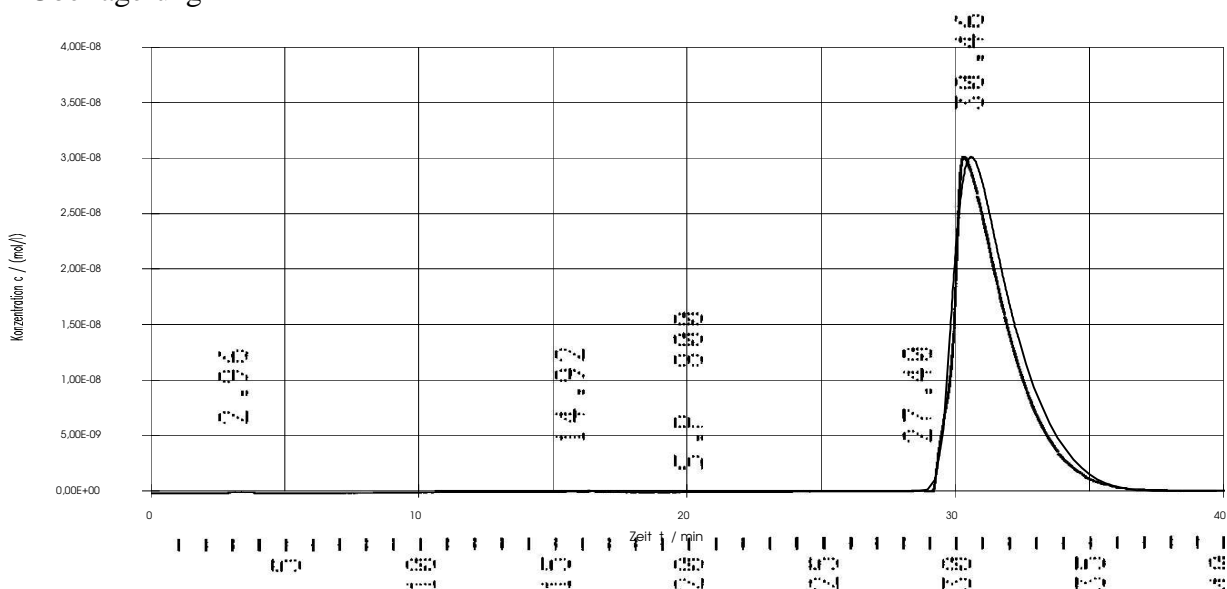
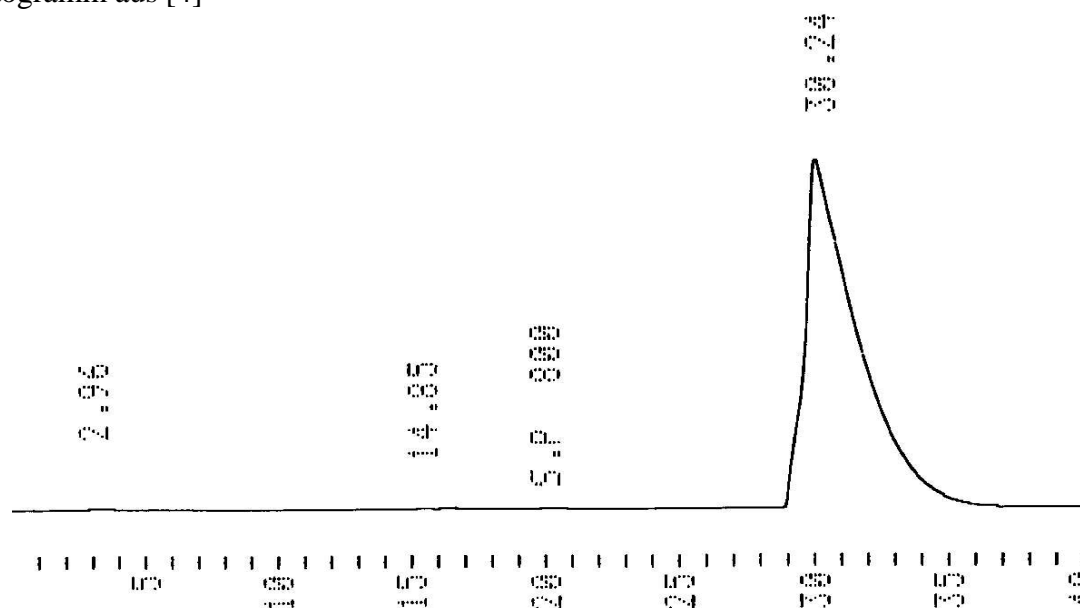
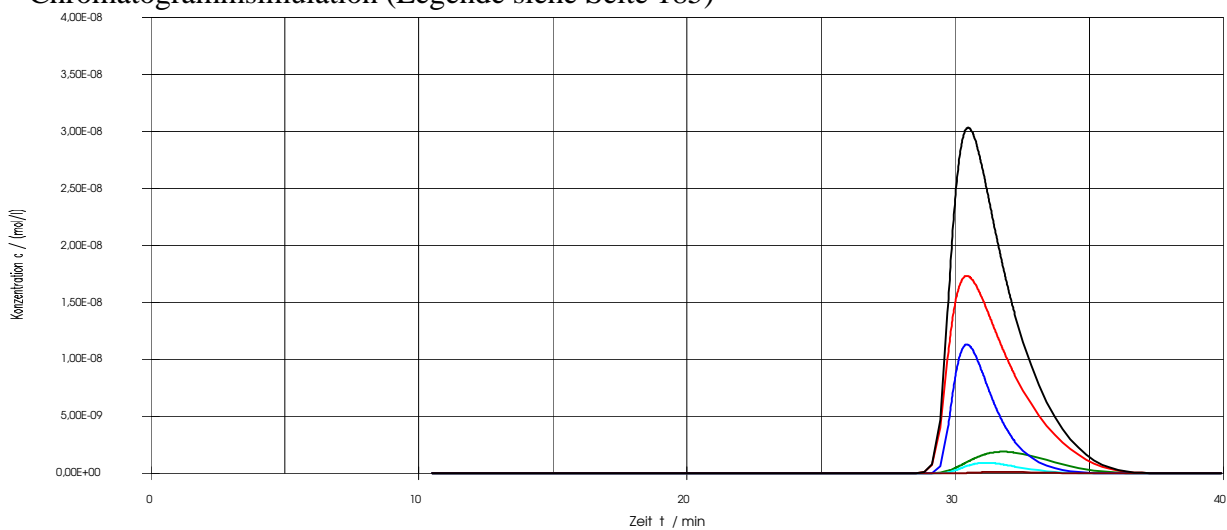


Abb. A49 : N-Benzoyl-leucinmethylester Aufgabe: 20µg, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

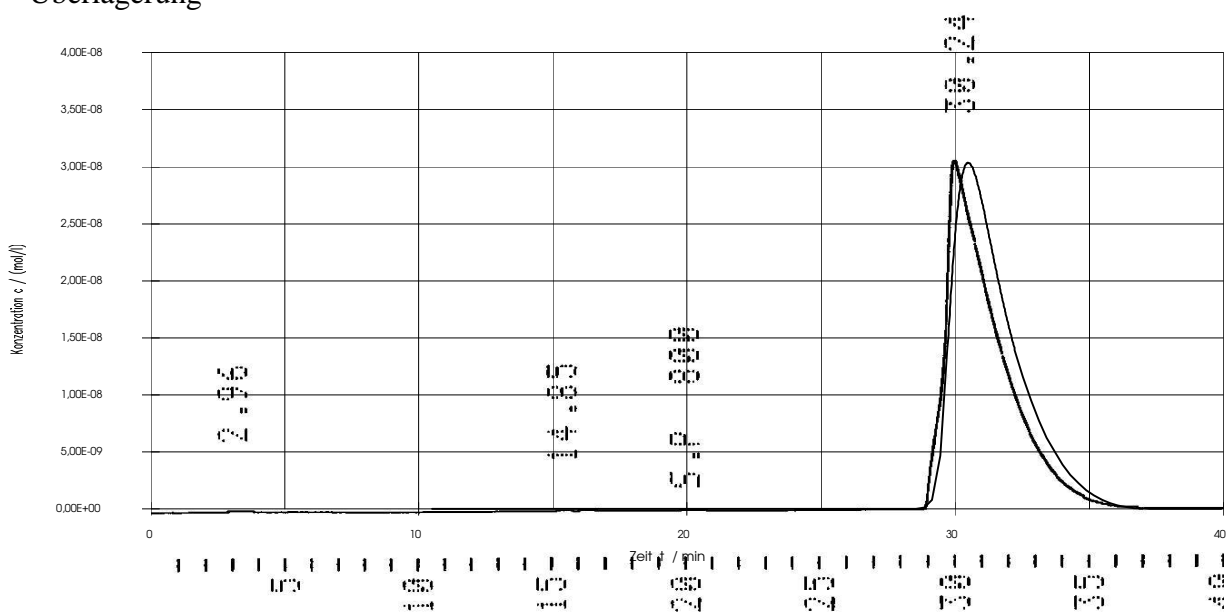
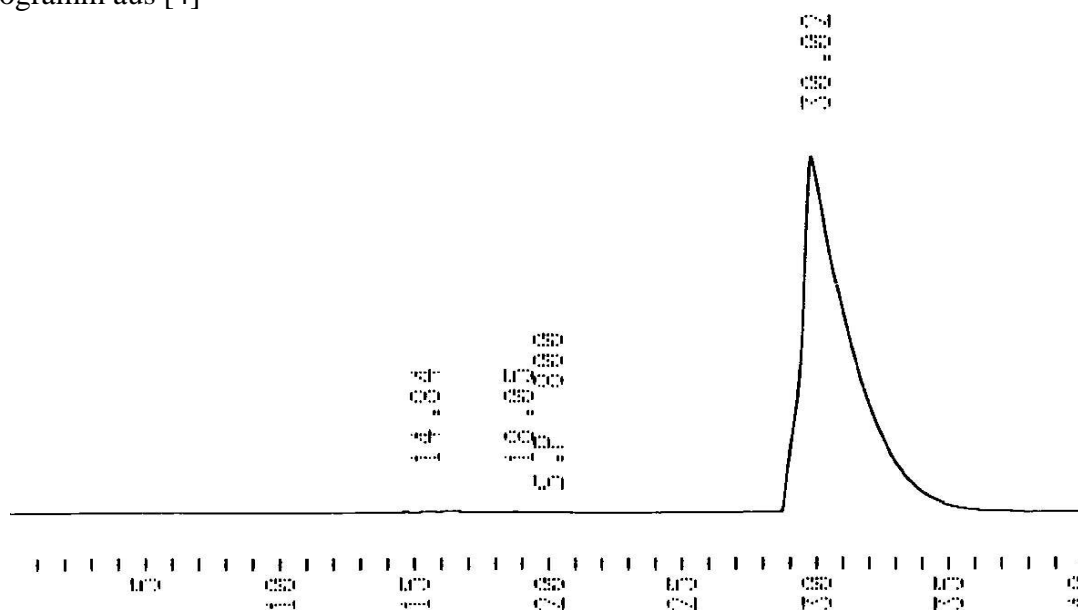
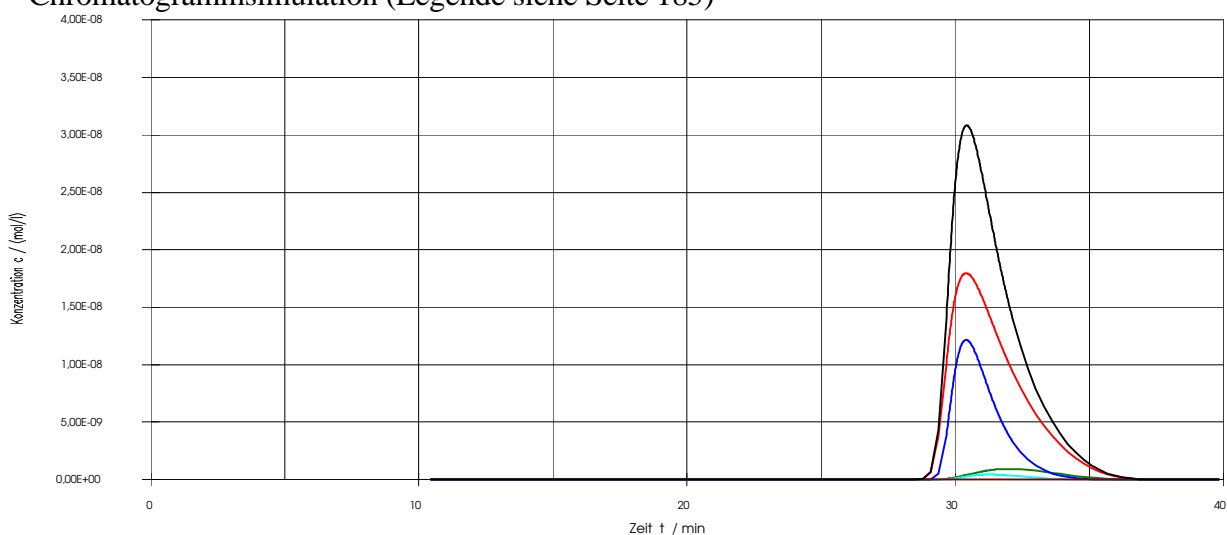


Abb. A50 : N-Benzoyl-leucinmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

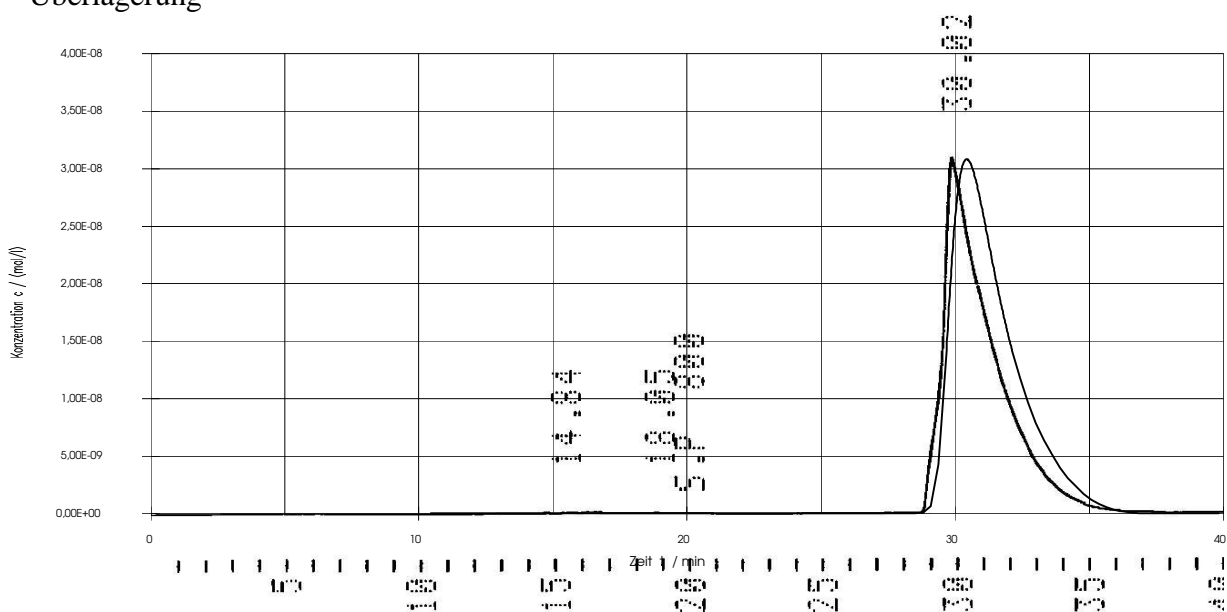
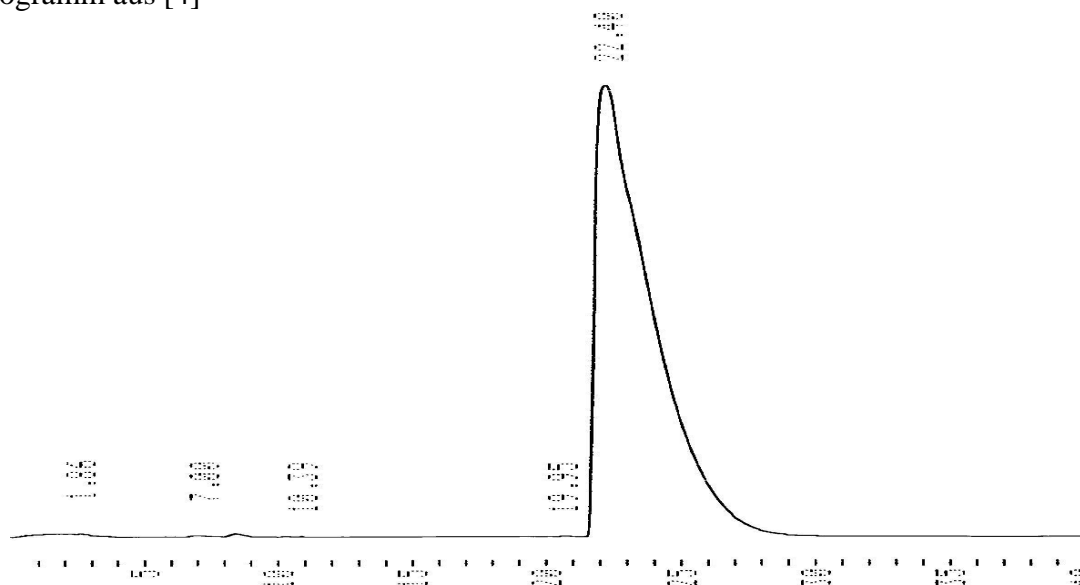
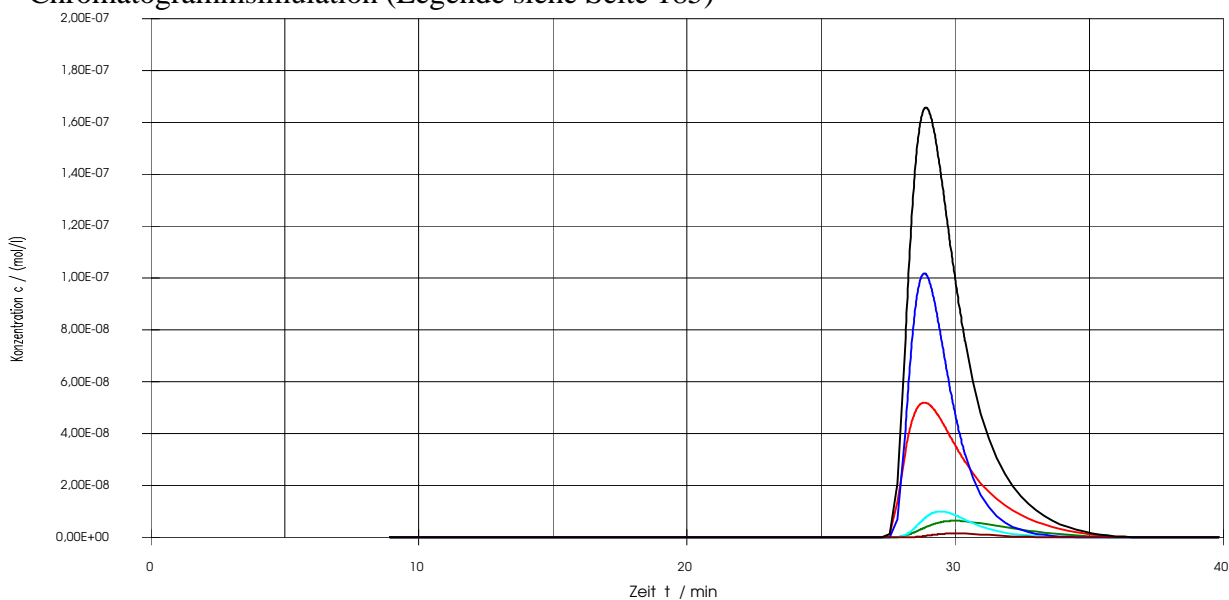


Abb. A51 : N-Benzoyl-leucinmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

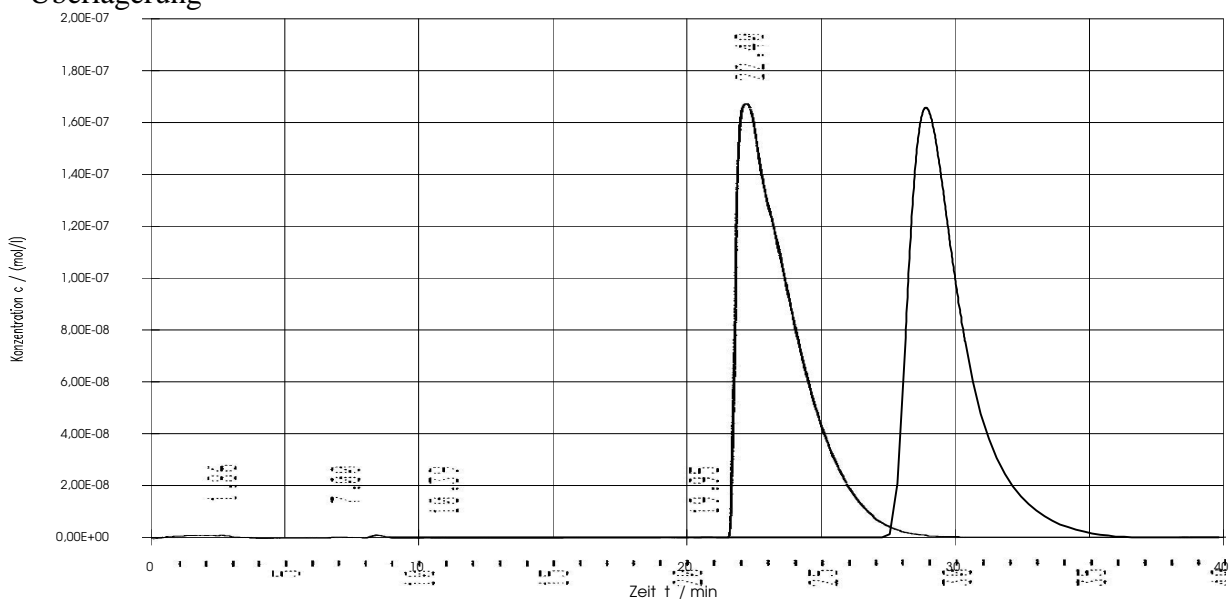
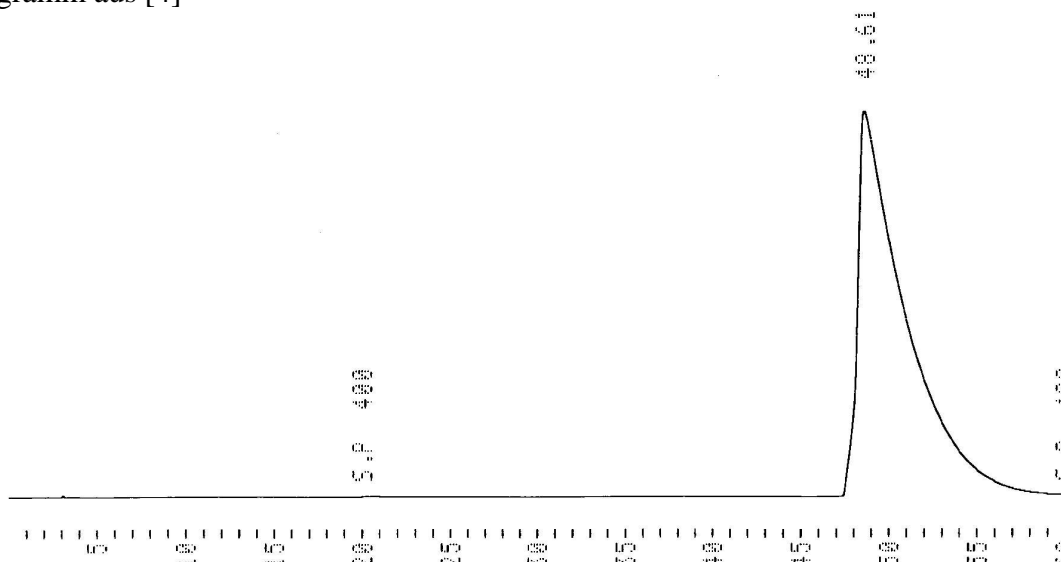
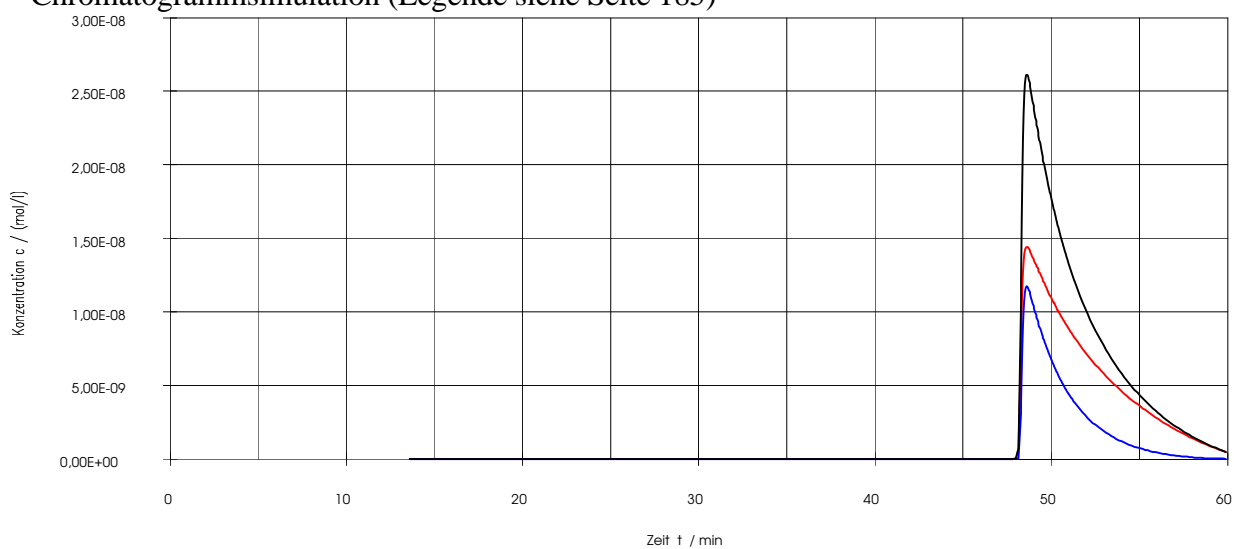


Abb. A52 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

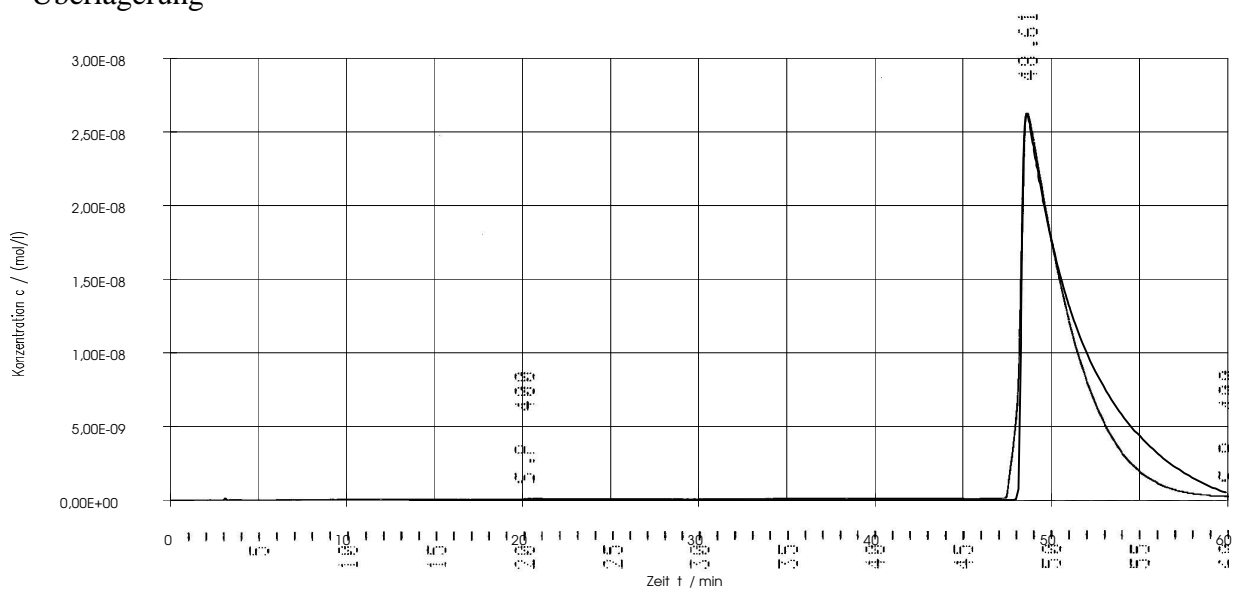
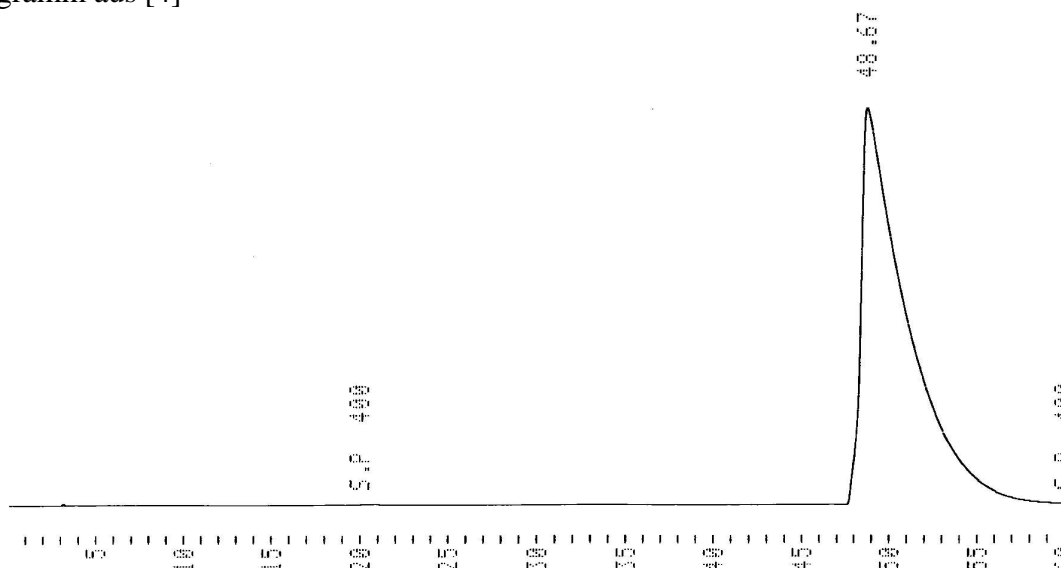
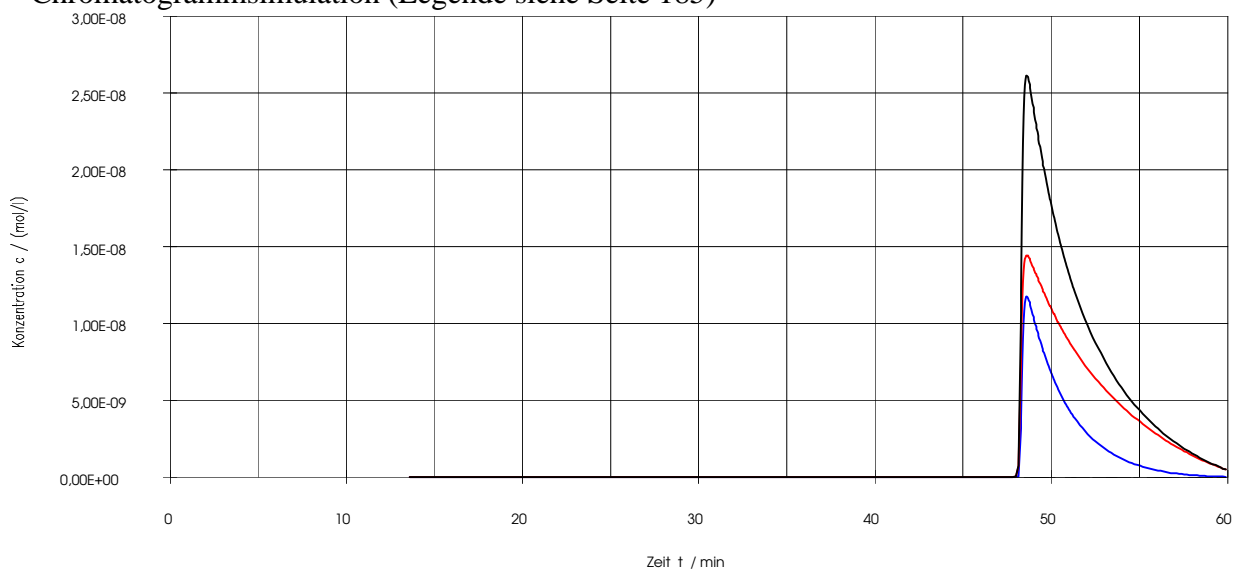


Abb. A53 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

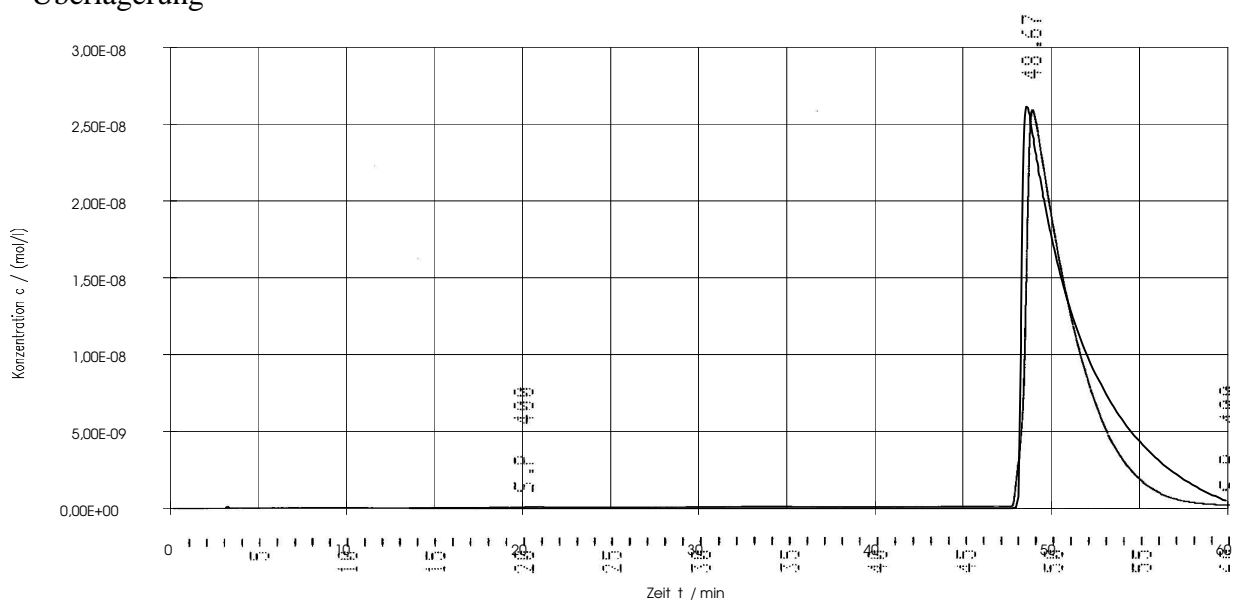
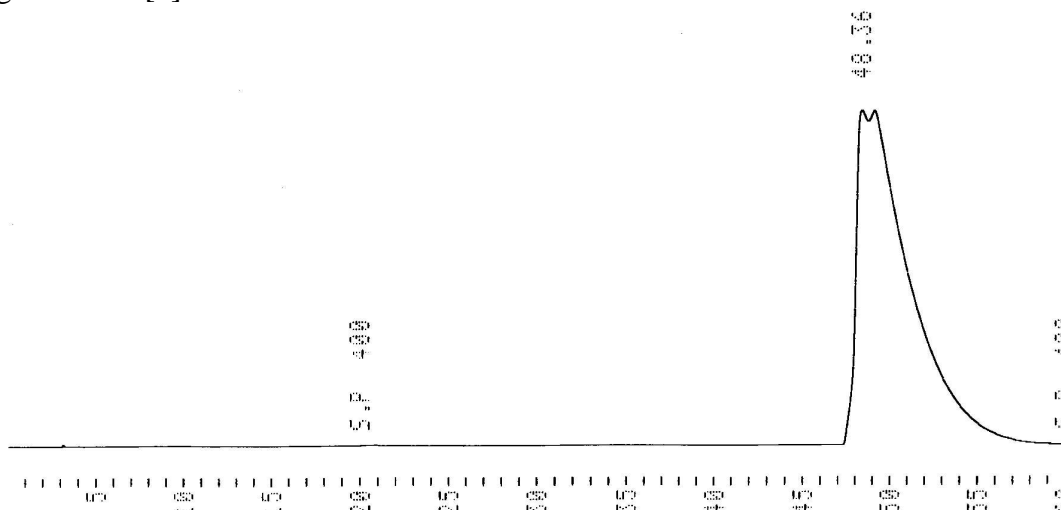
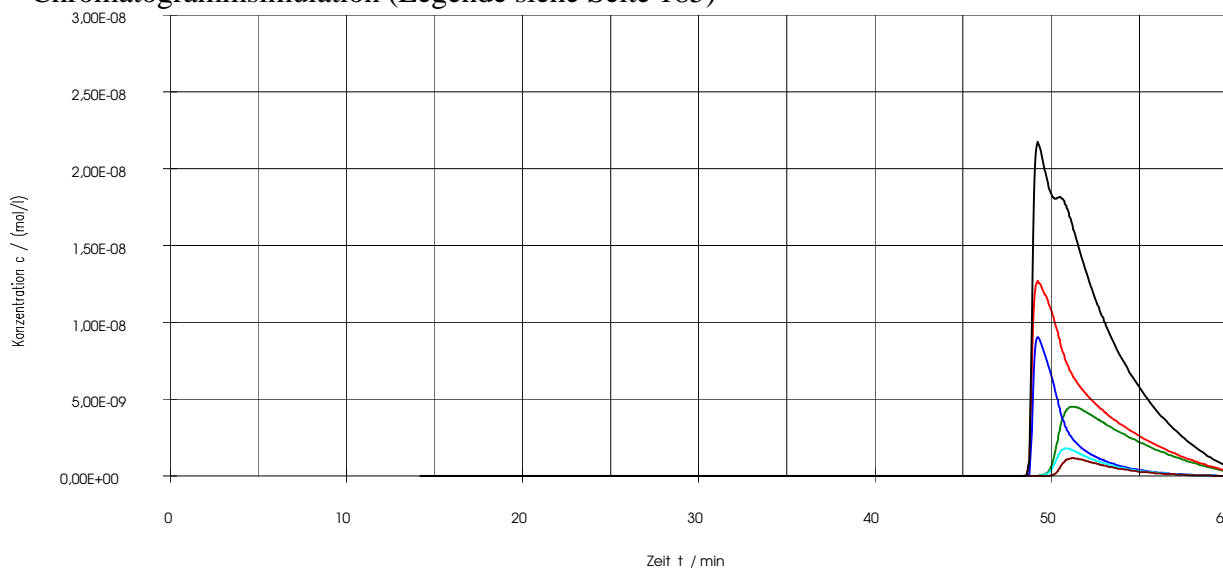


Abb. A54 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 40 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

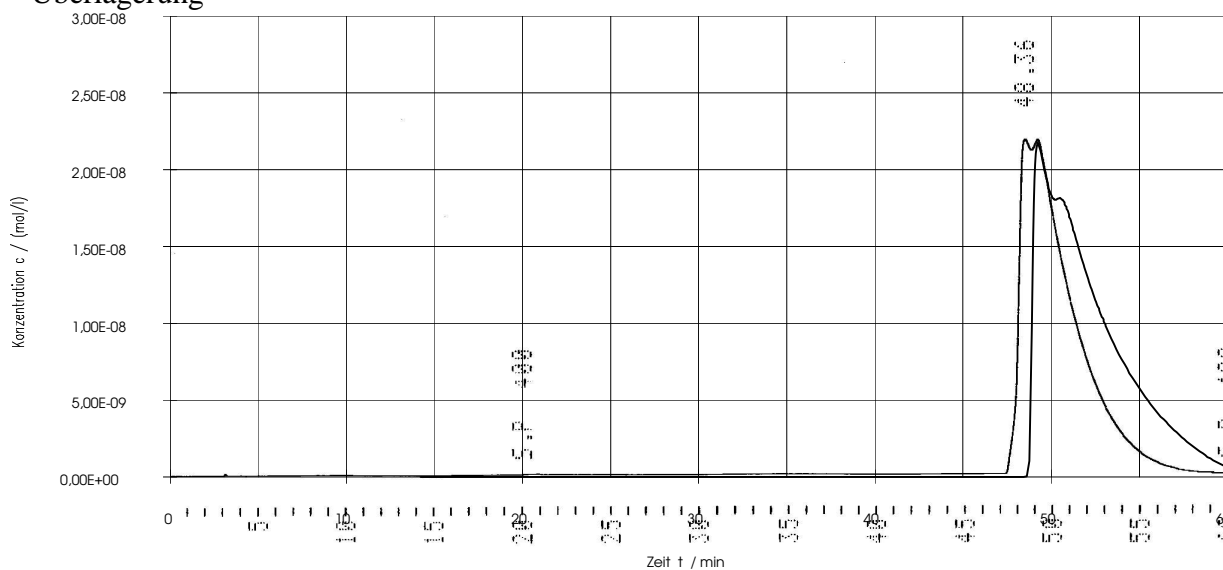
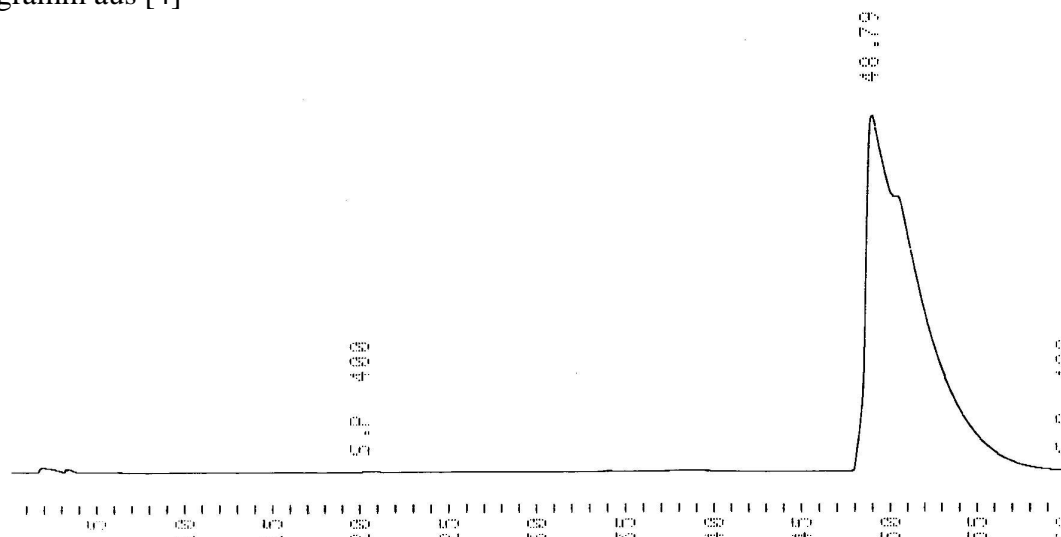
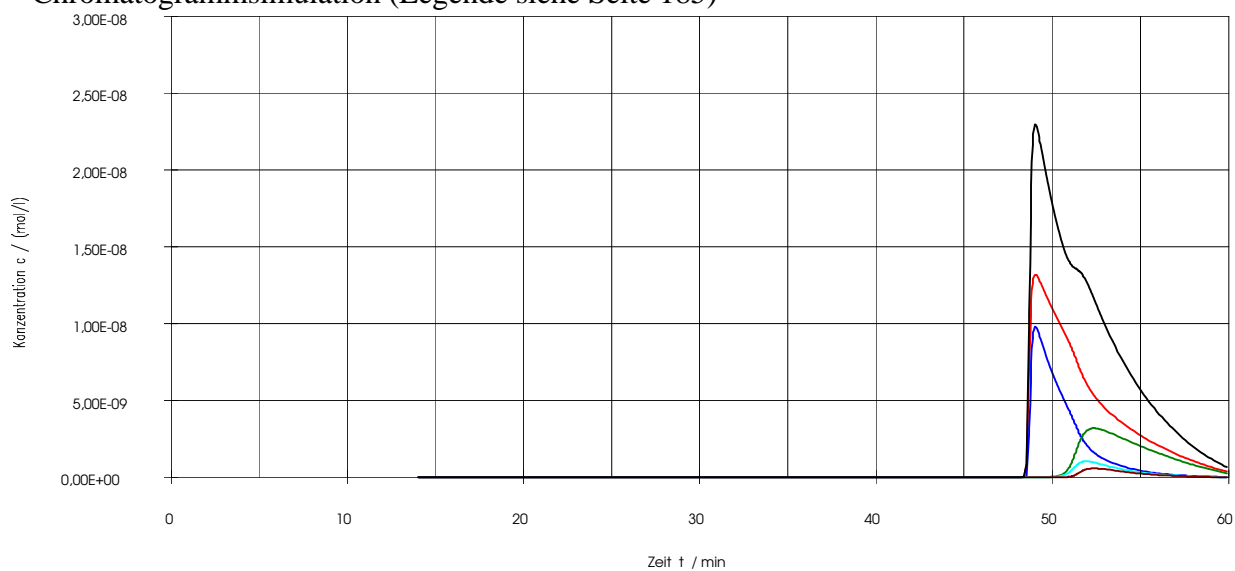




Abb. A55 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

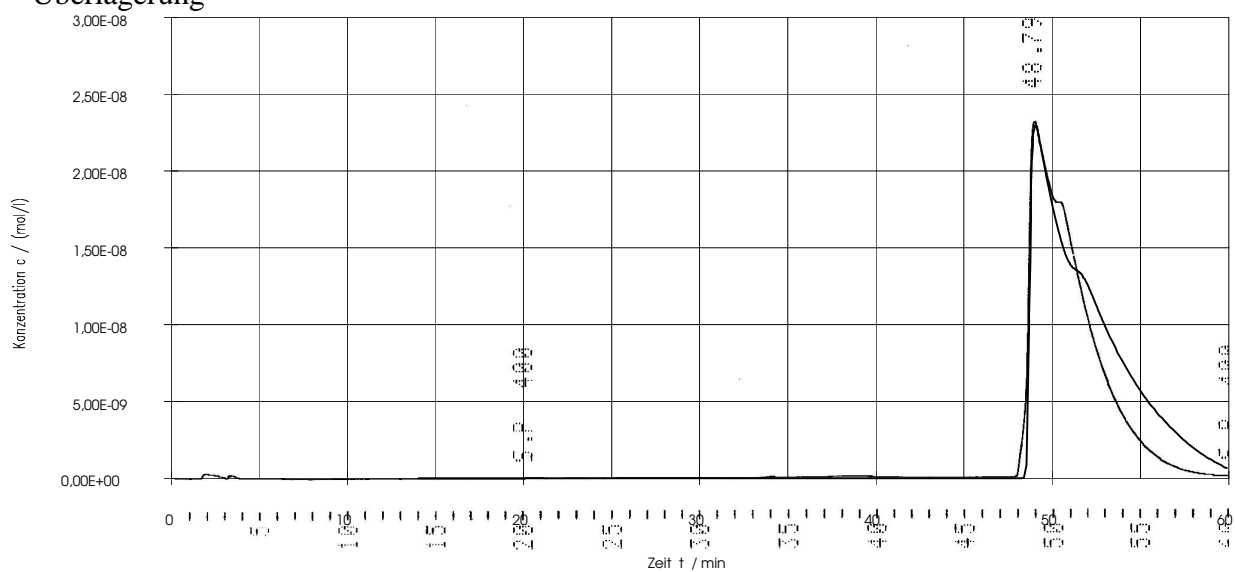
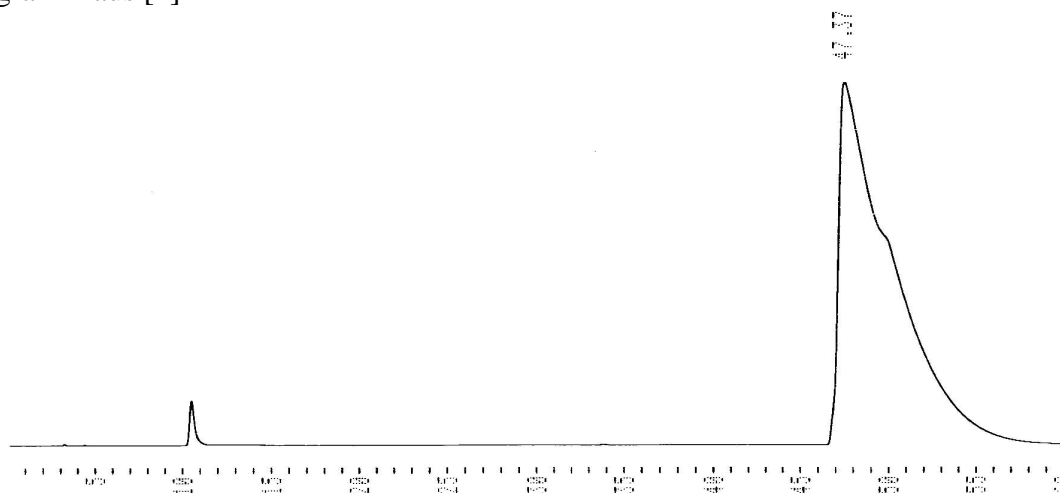
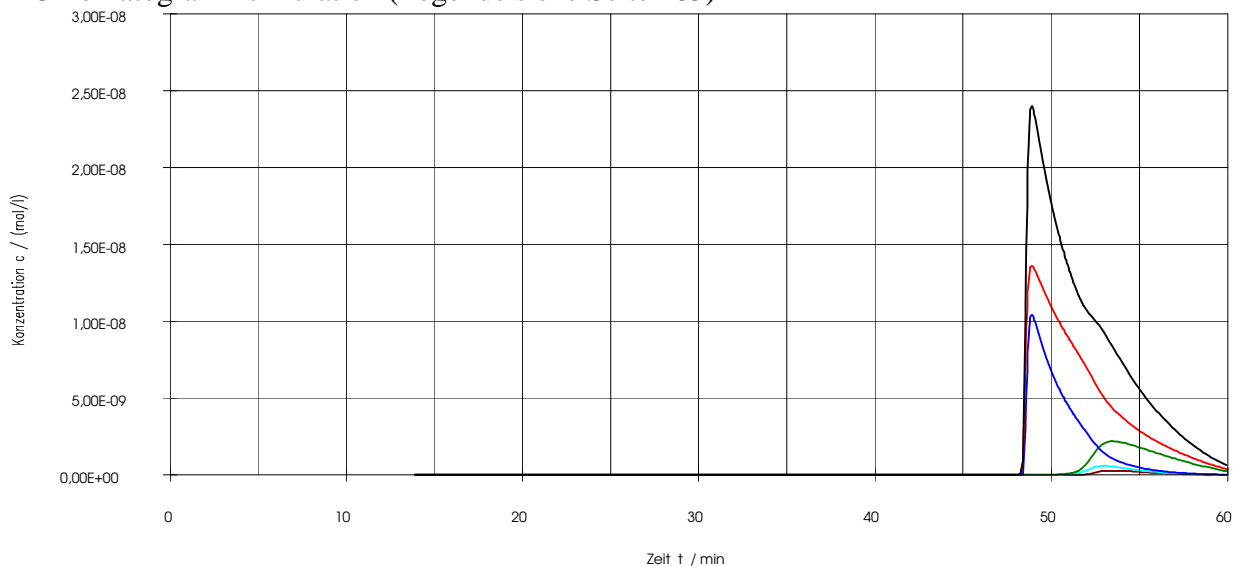


Abb. A56 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 74 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

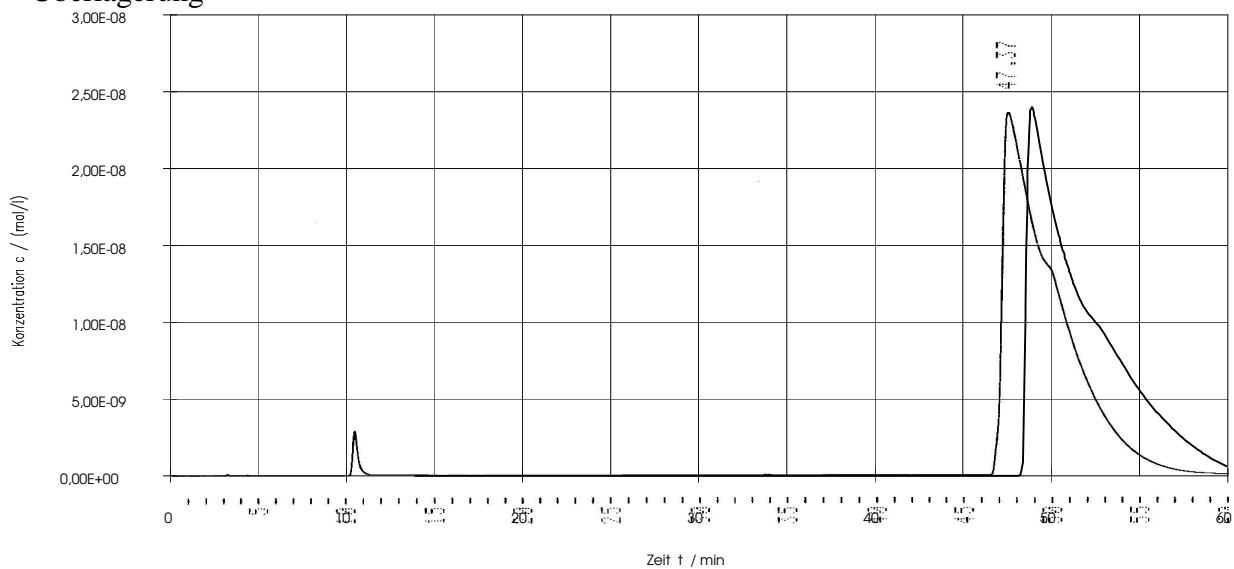
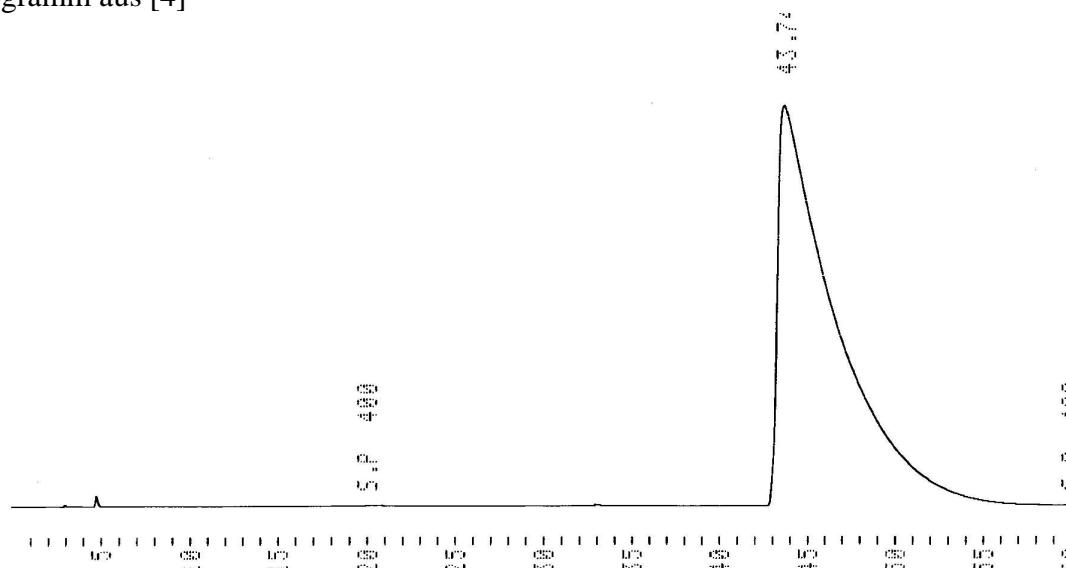
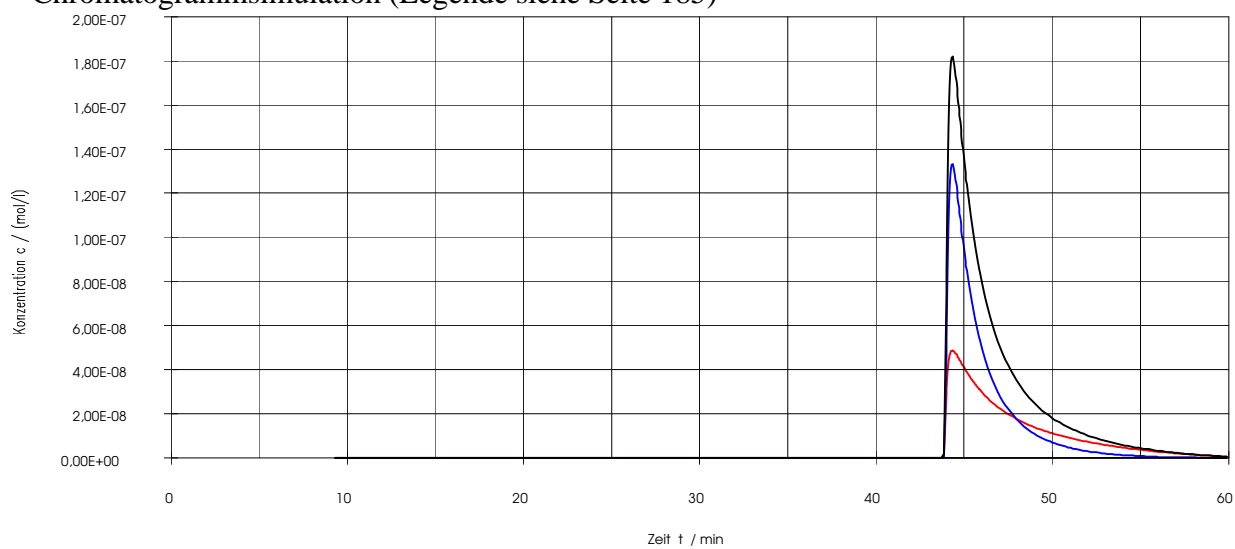


Abb. A57 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

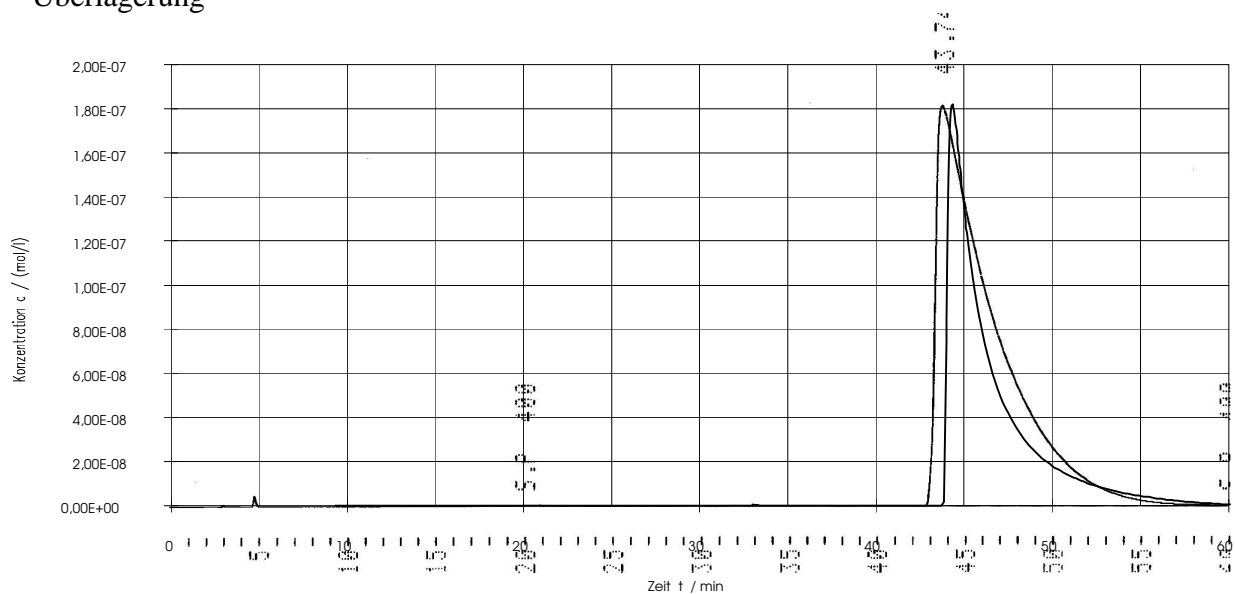
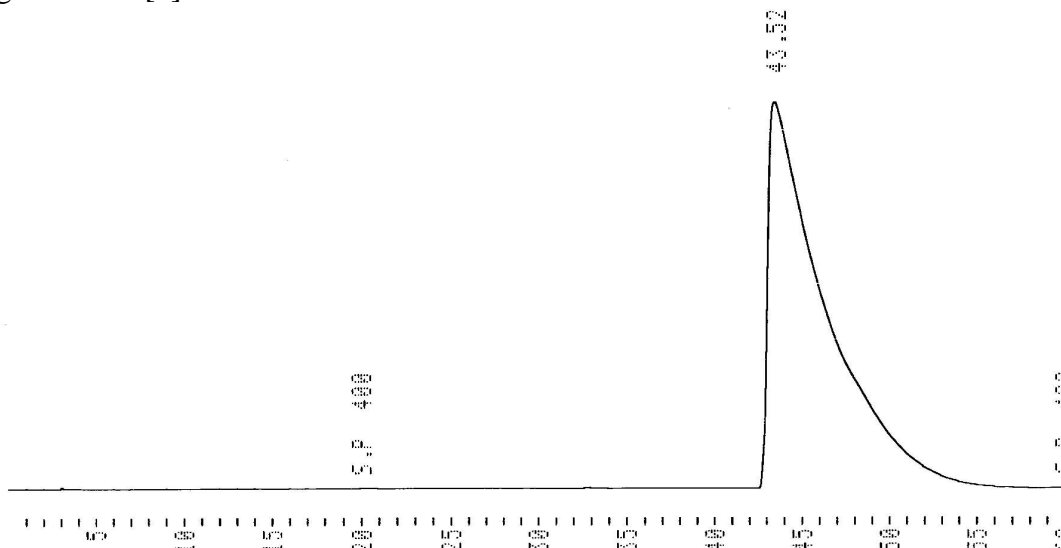
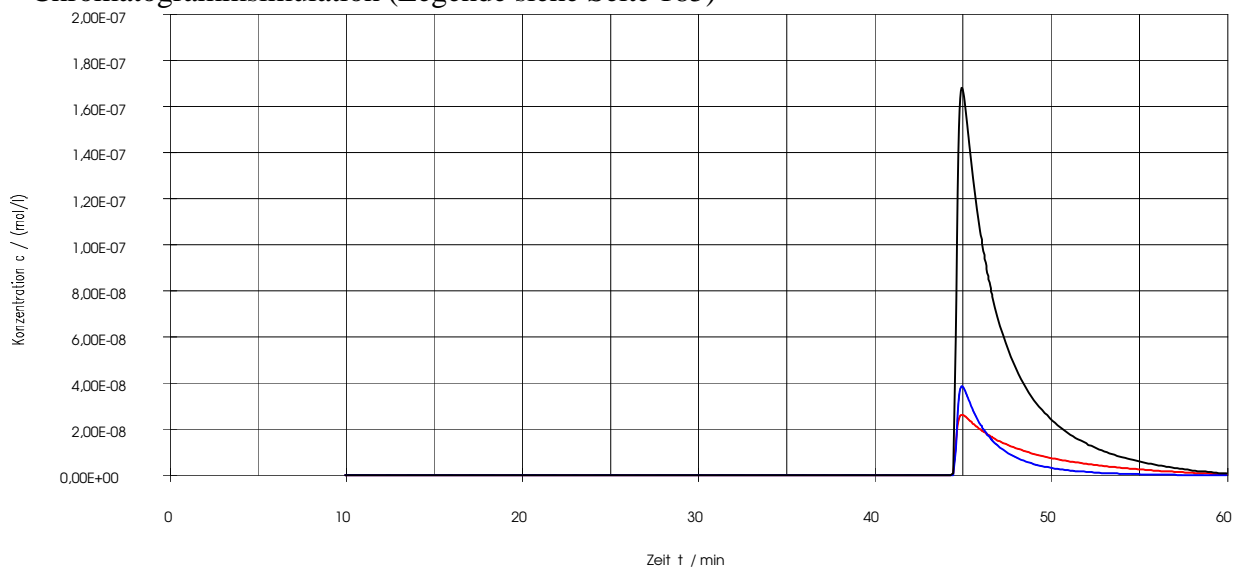


Abb. A58 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

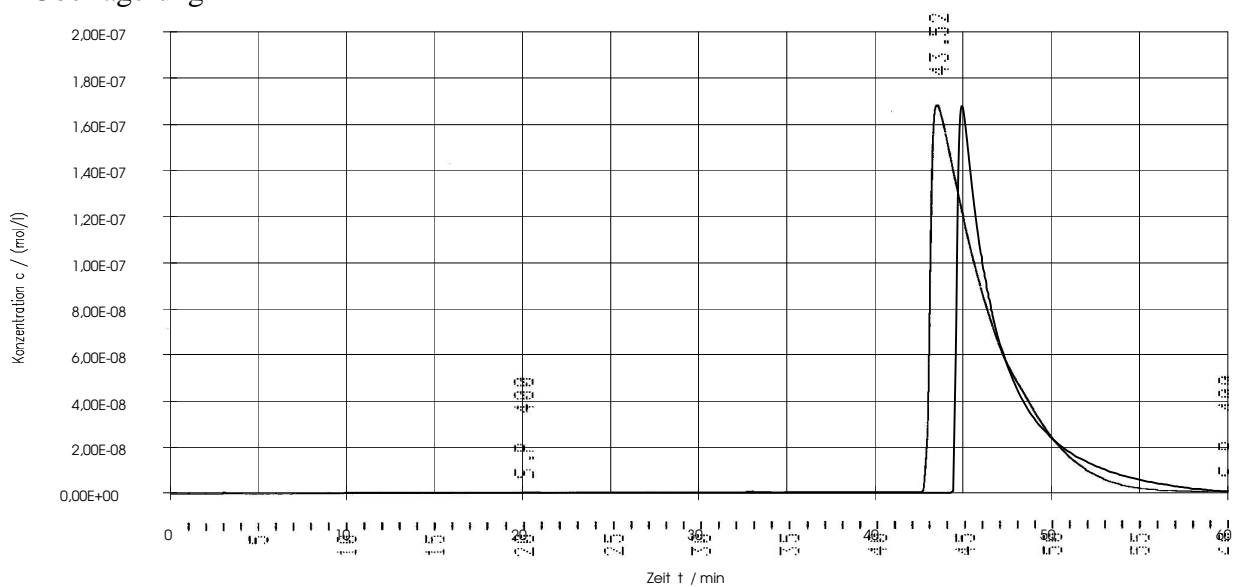
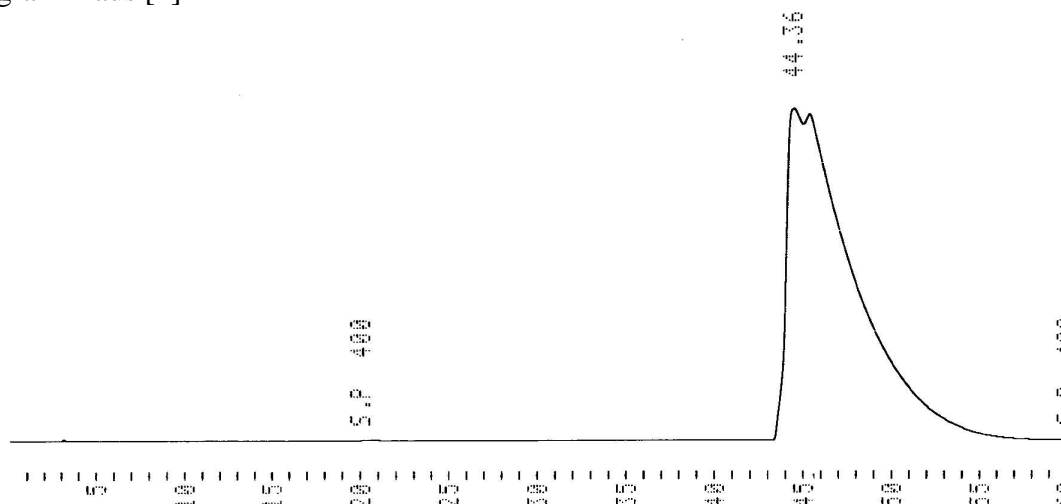
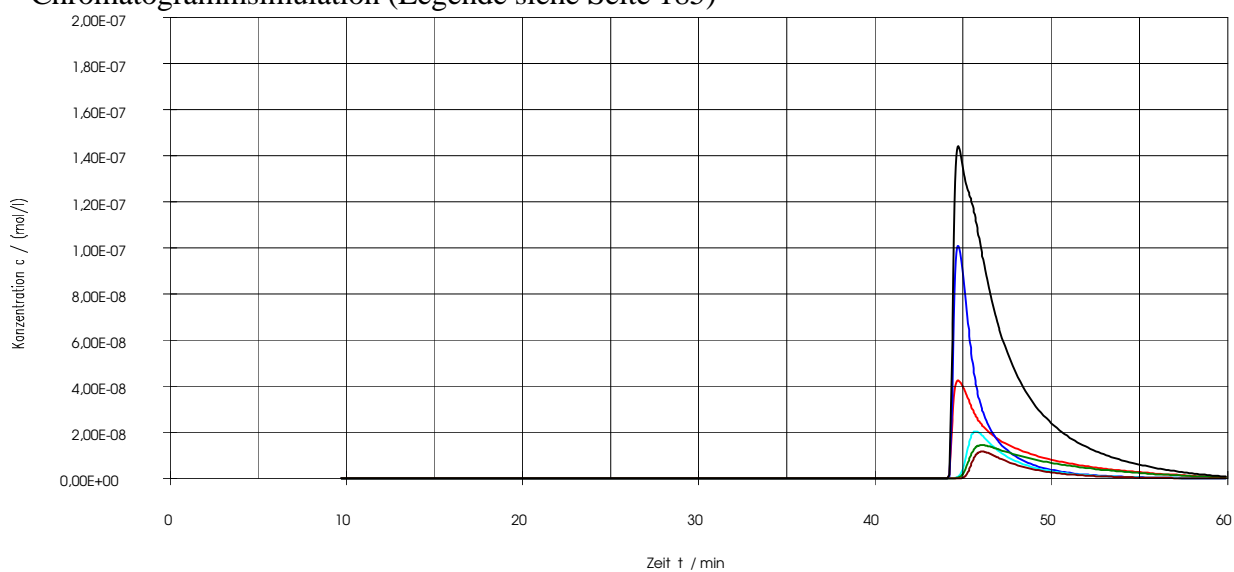


Abb. A59 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 40 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

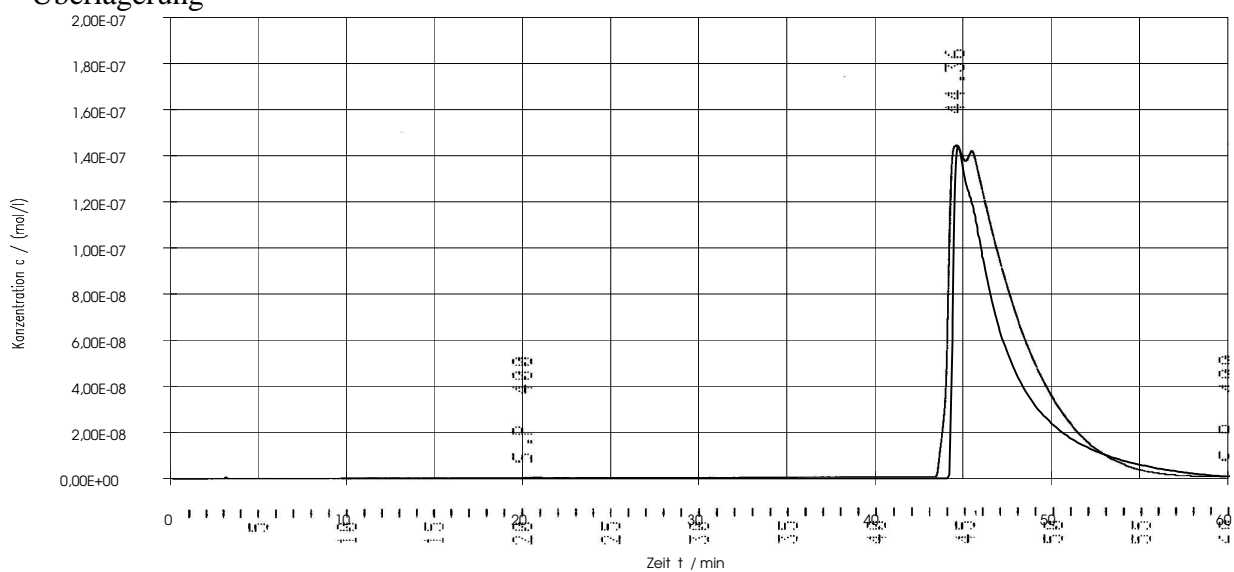
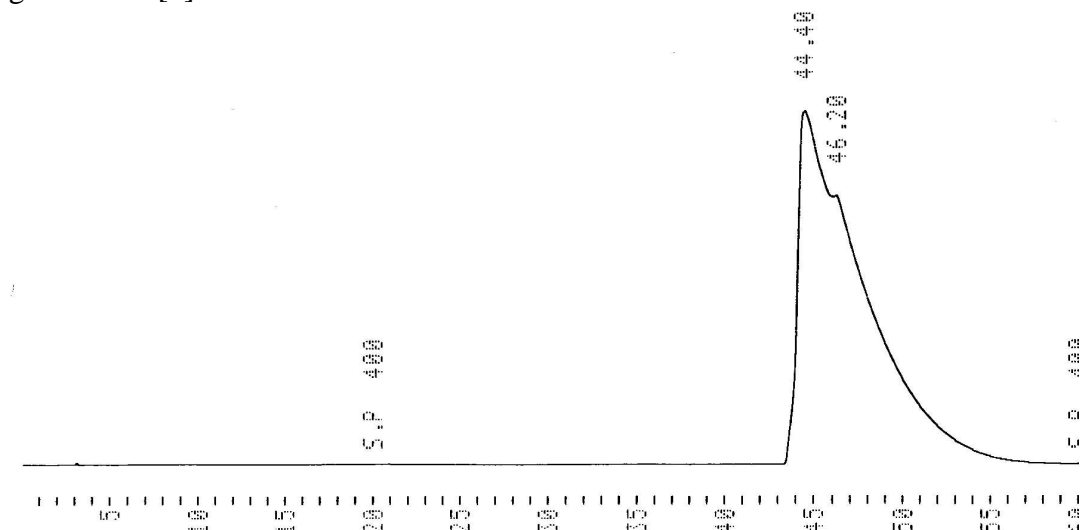
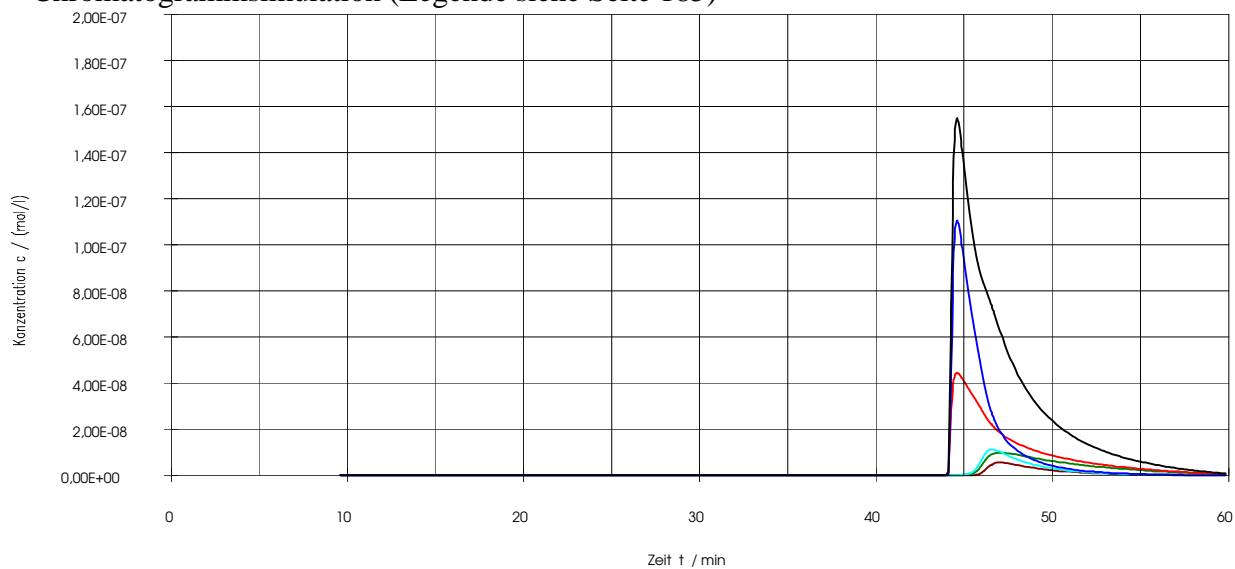


Abb. A60 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

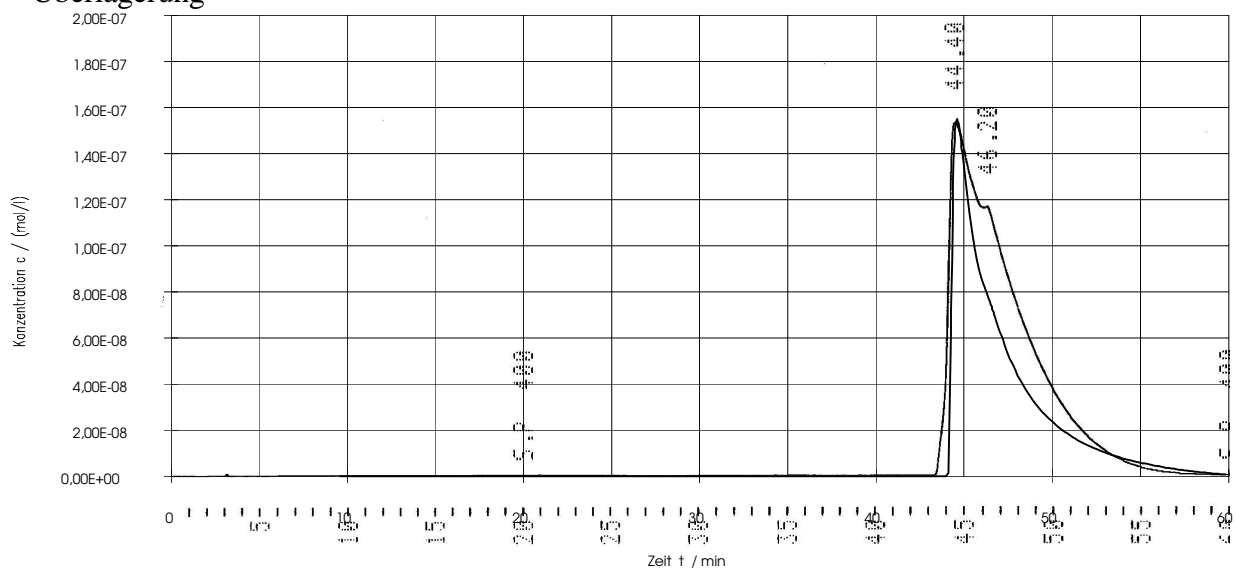
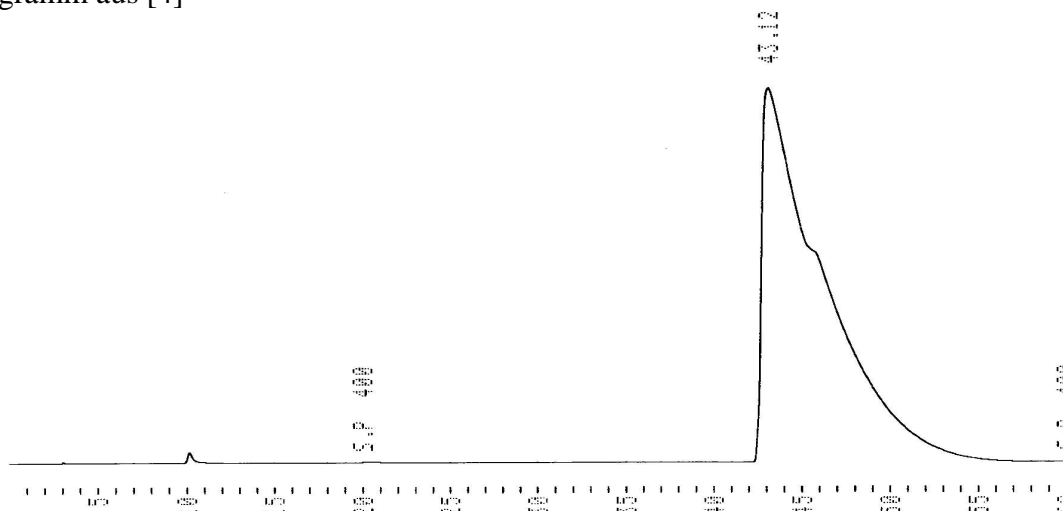
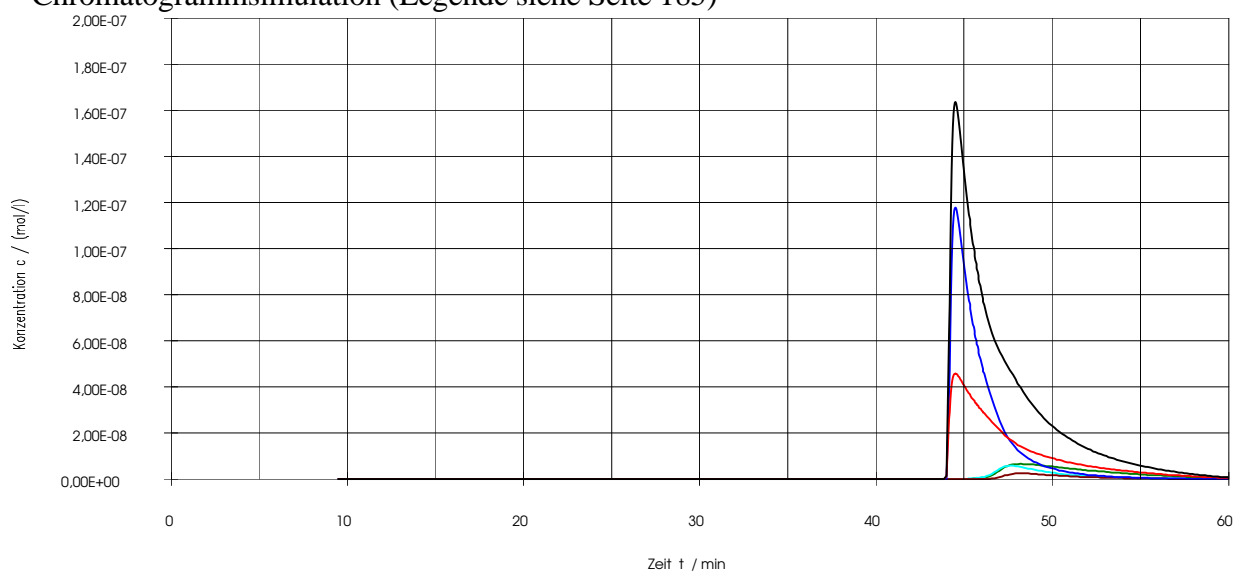


Abb. A61 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 74 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

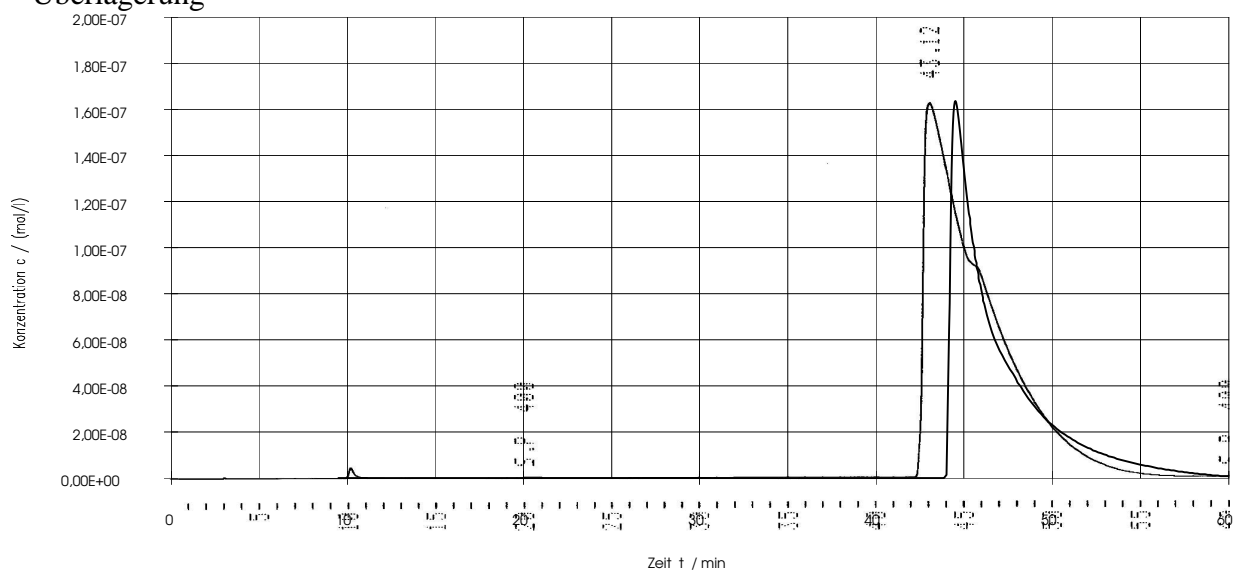
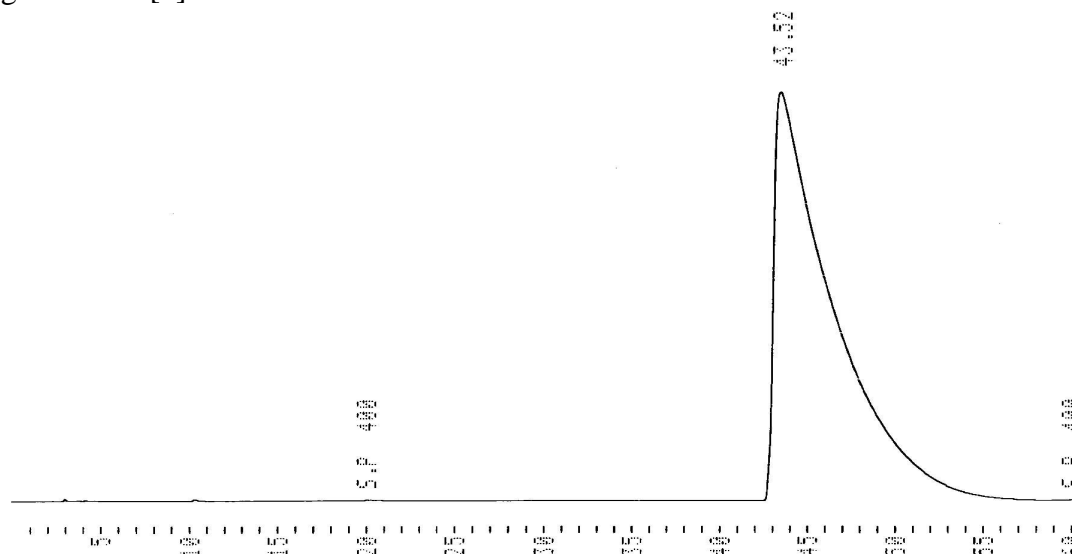
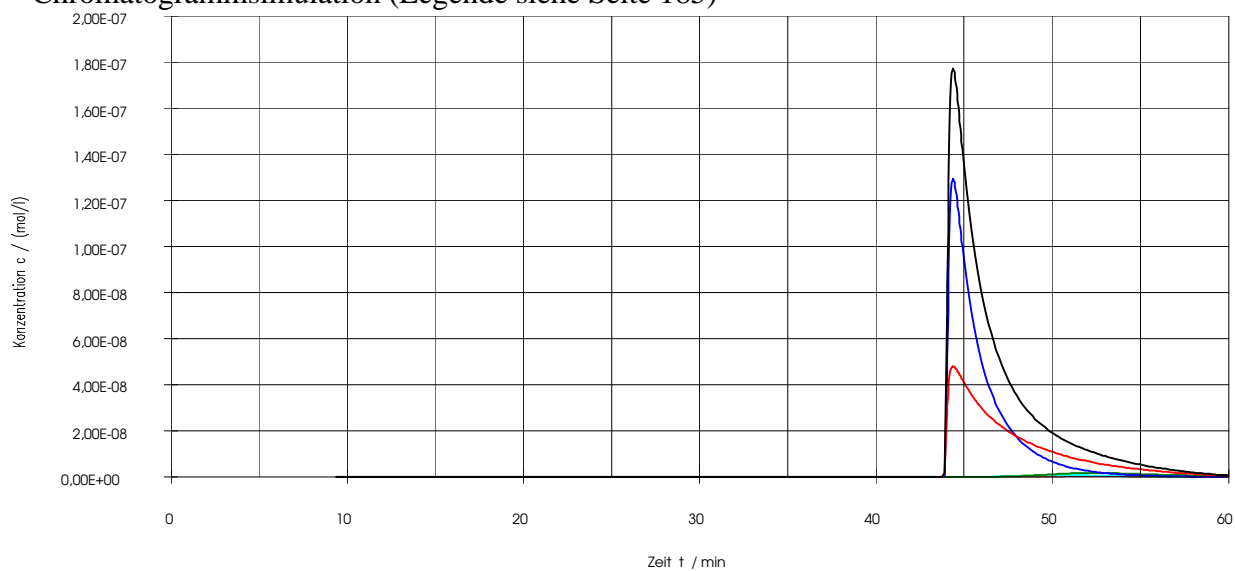


Abb. A62 : N-Benzoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 94 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

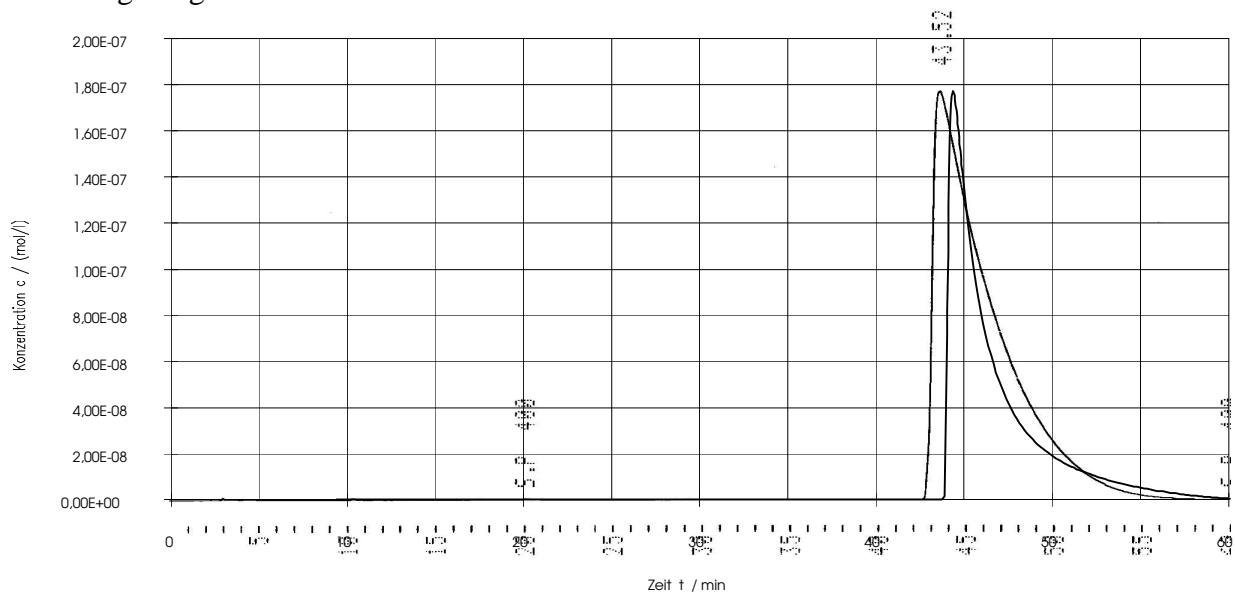
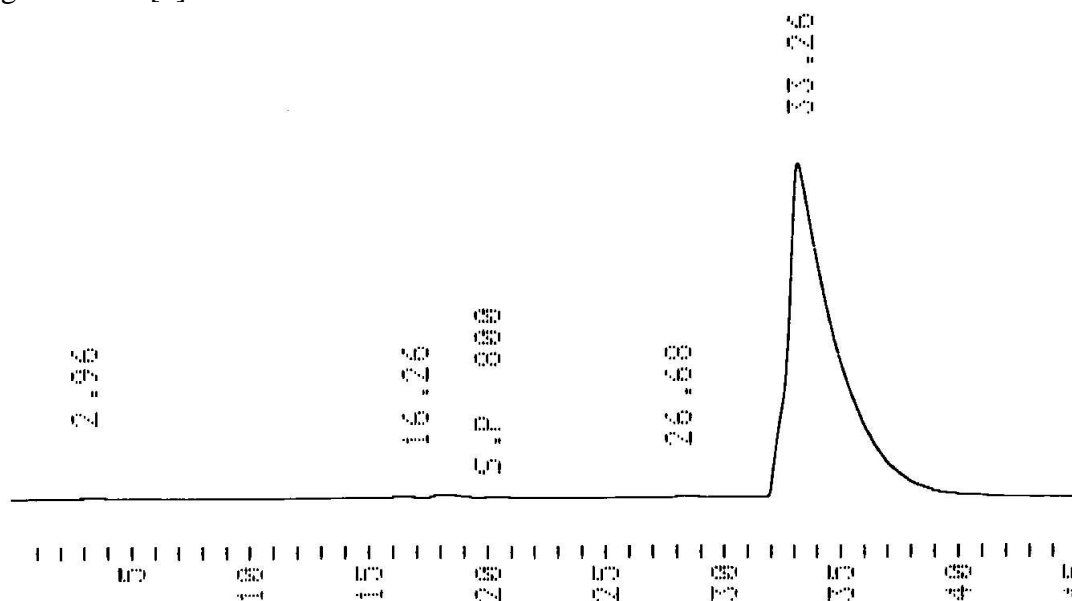
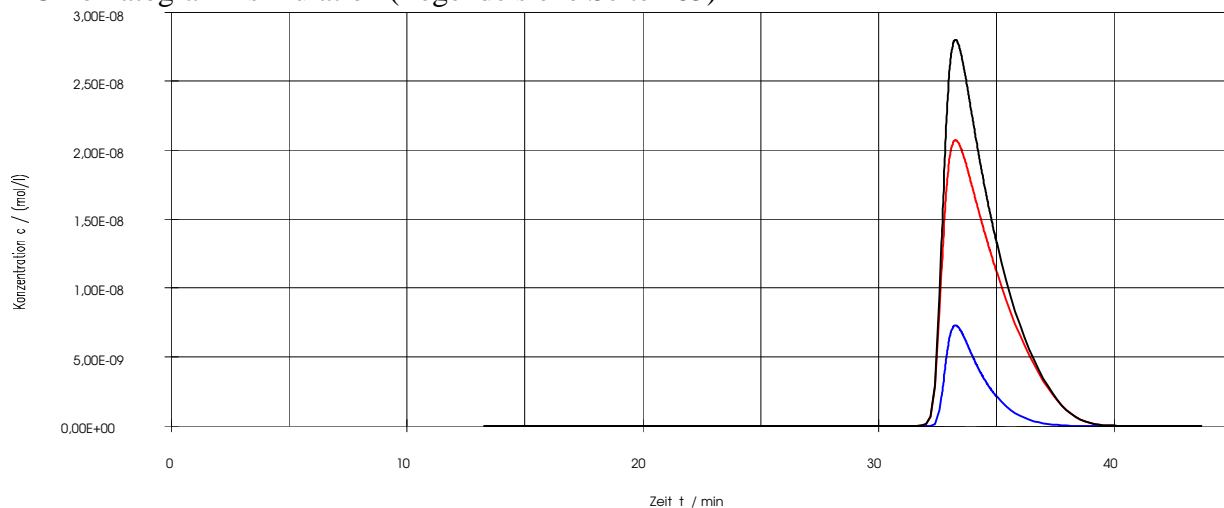




Abb. A63 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

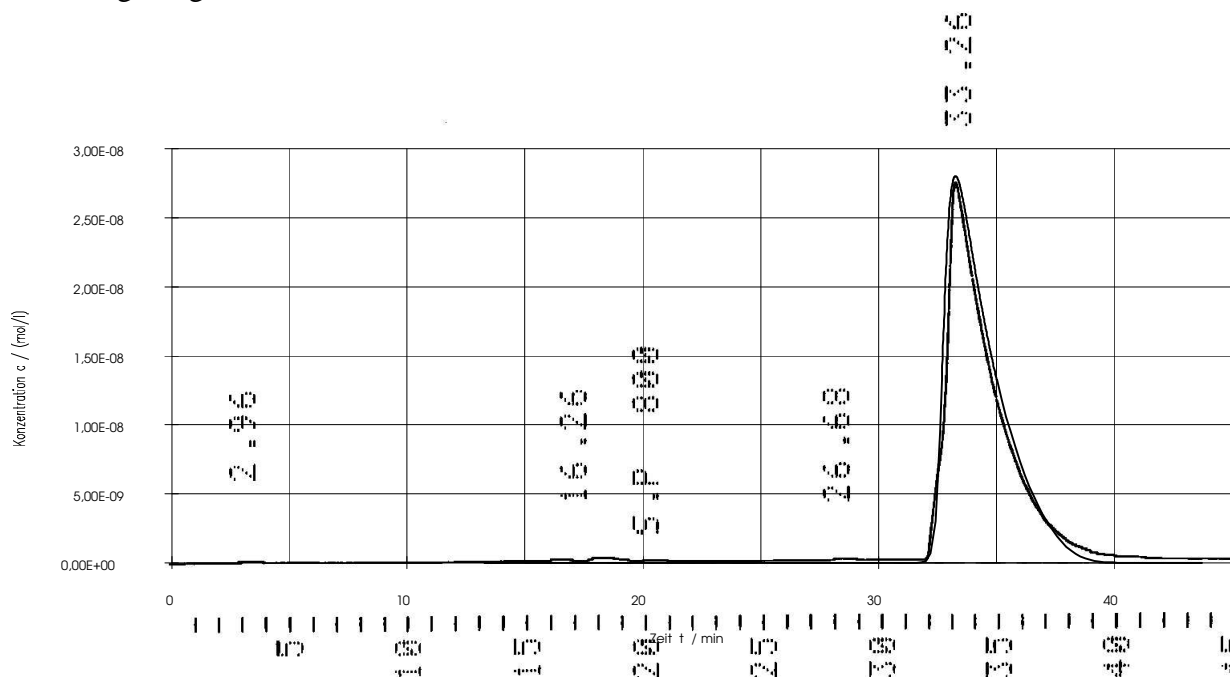
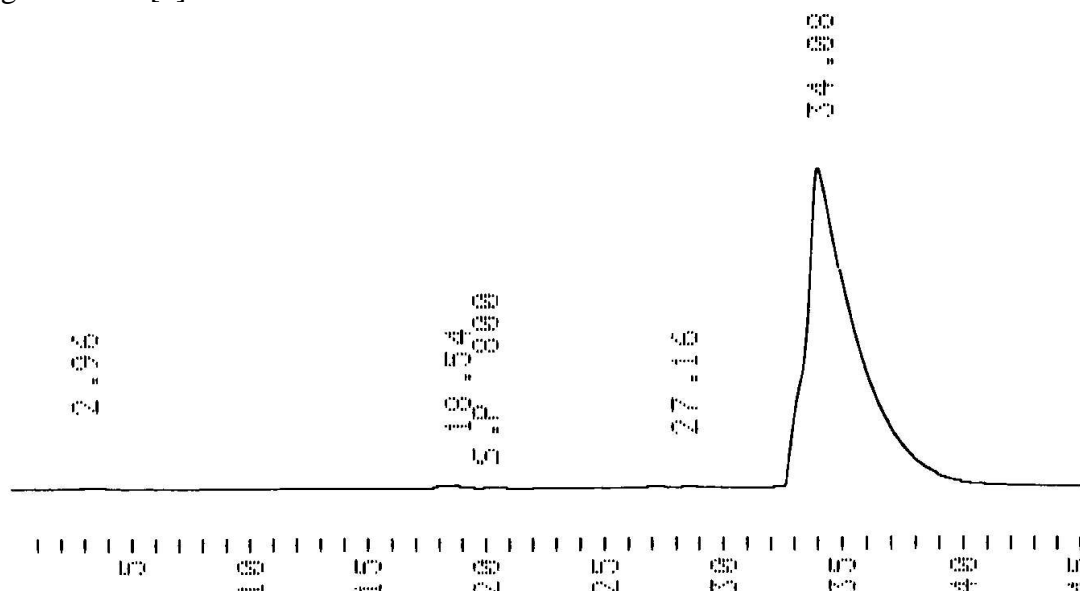
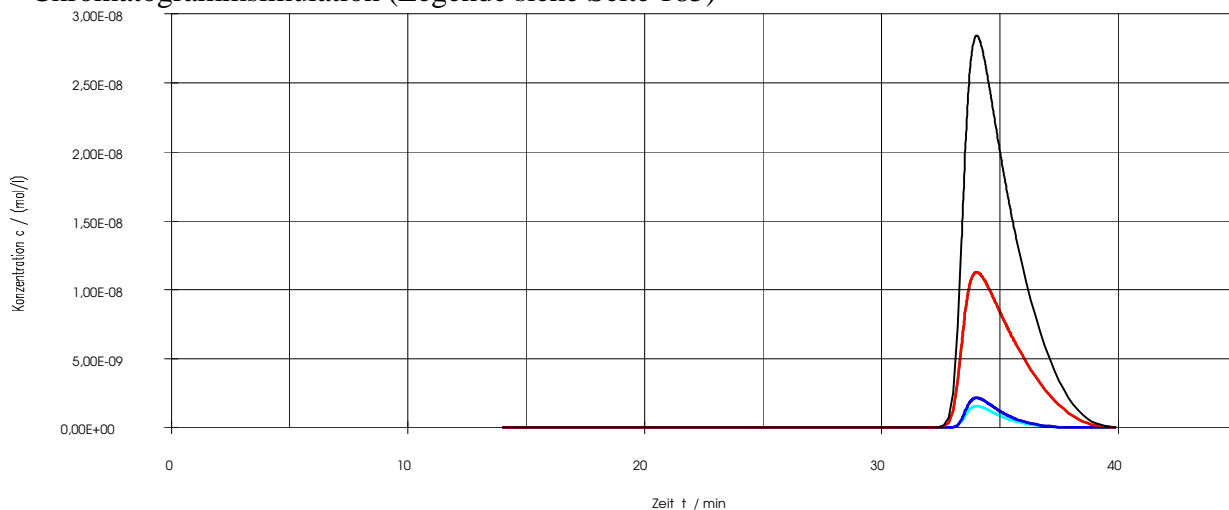


Abb. A64 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester Aufgabe: 20µg, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

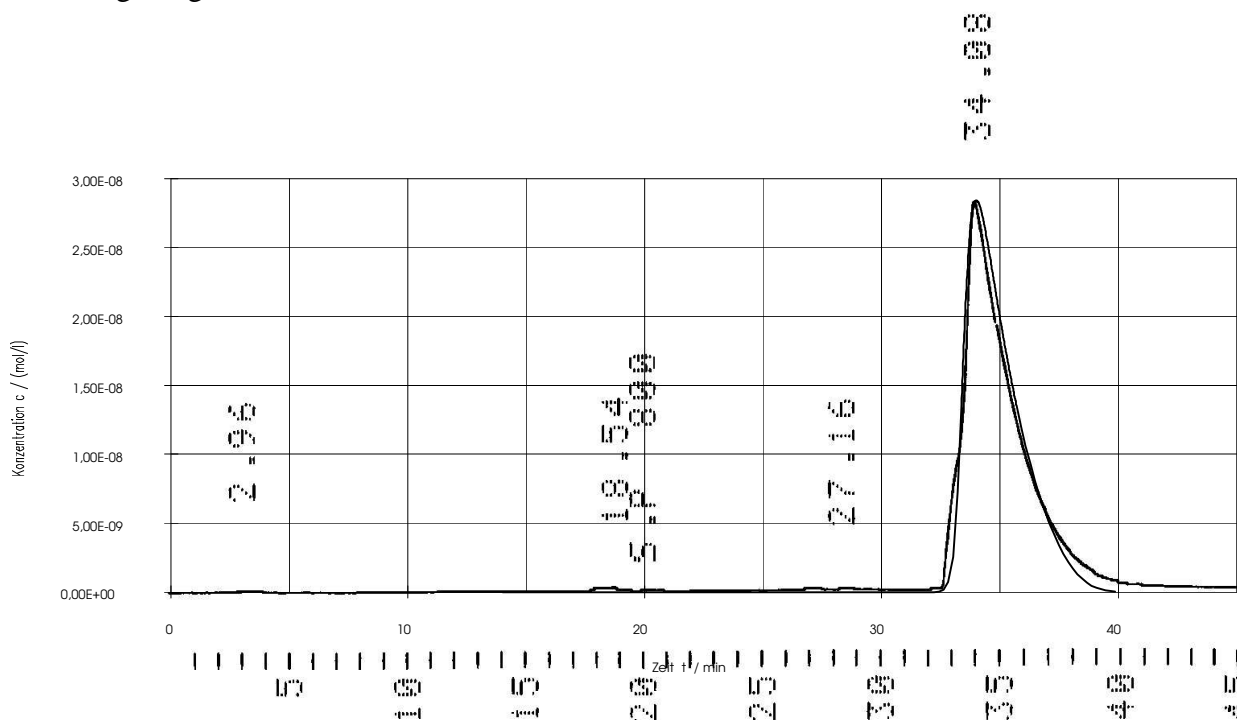
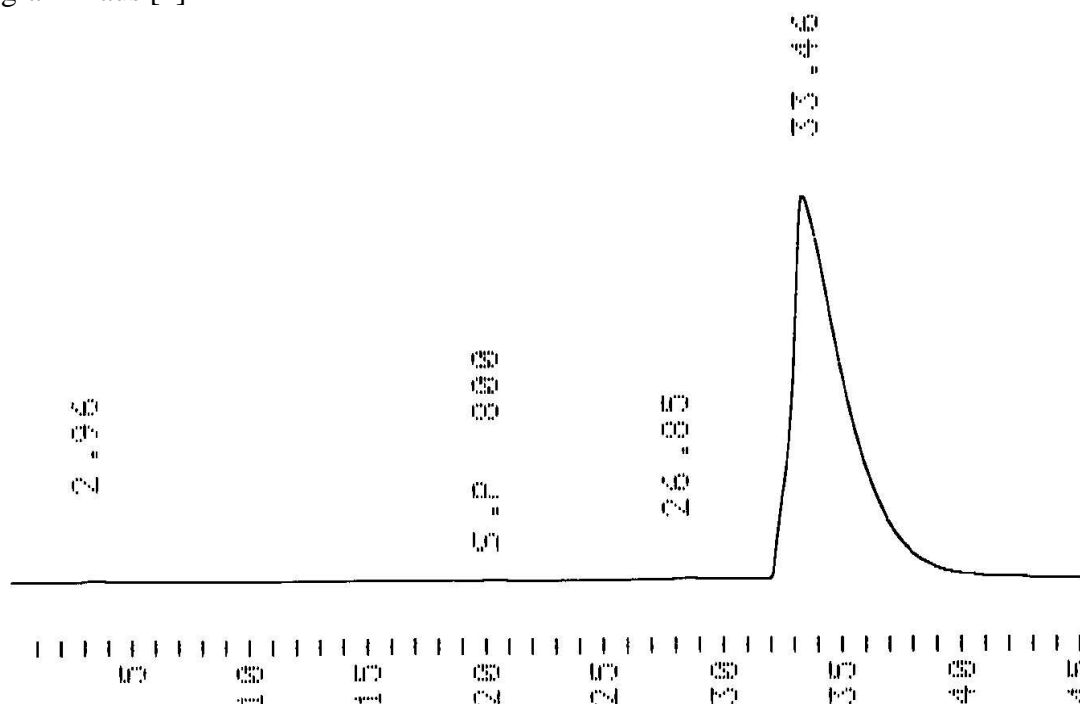
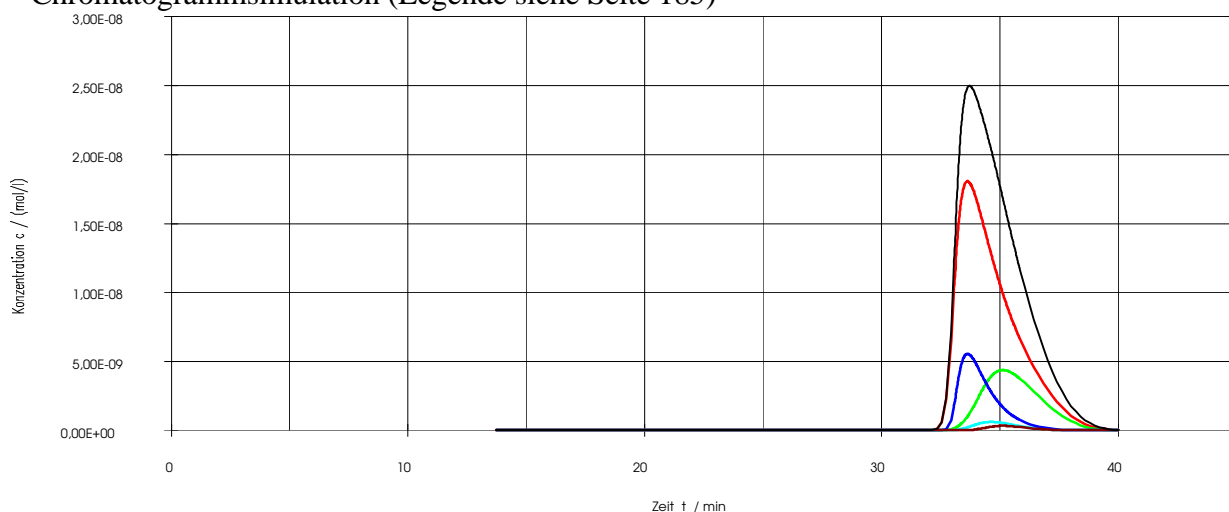


Abb. A65 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

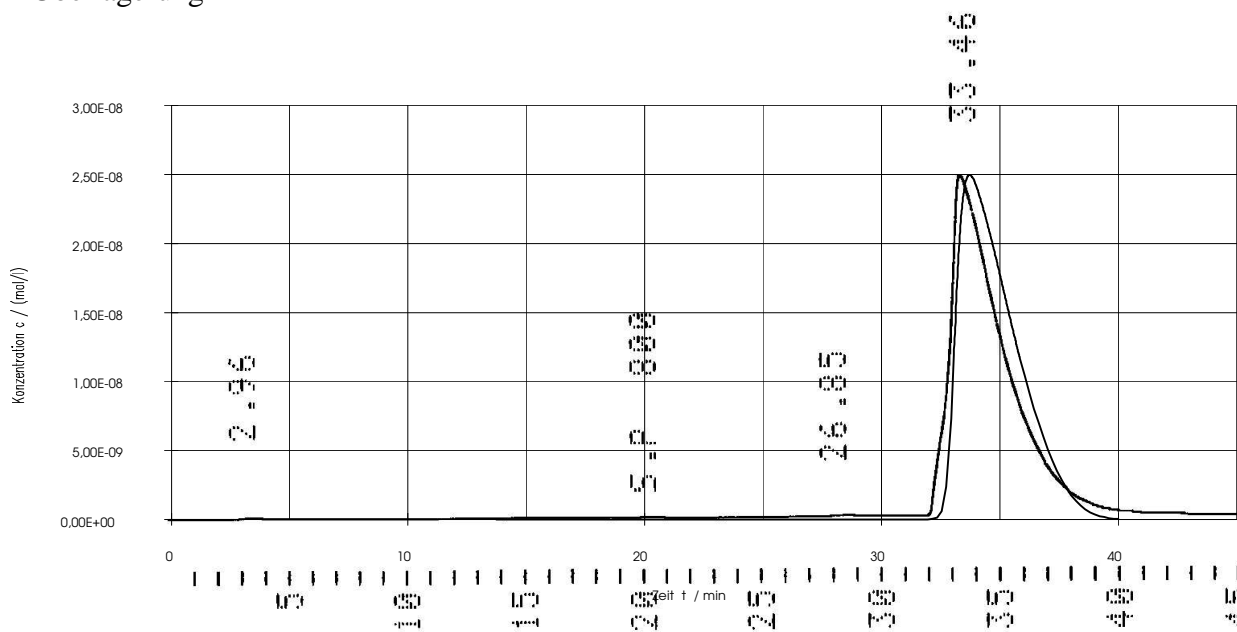
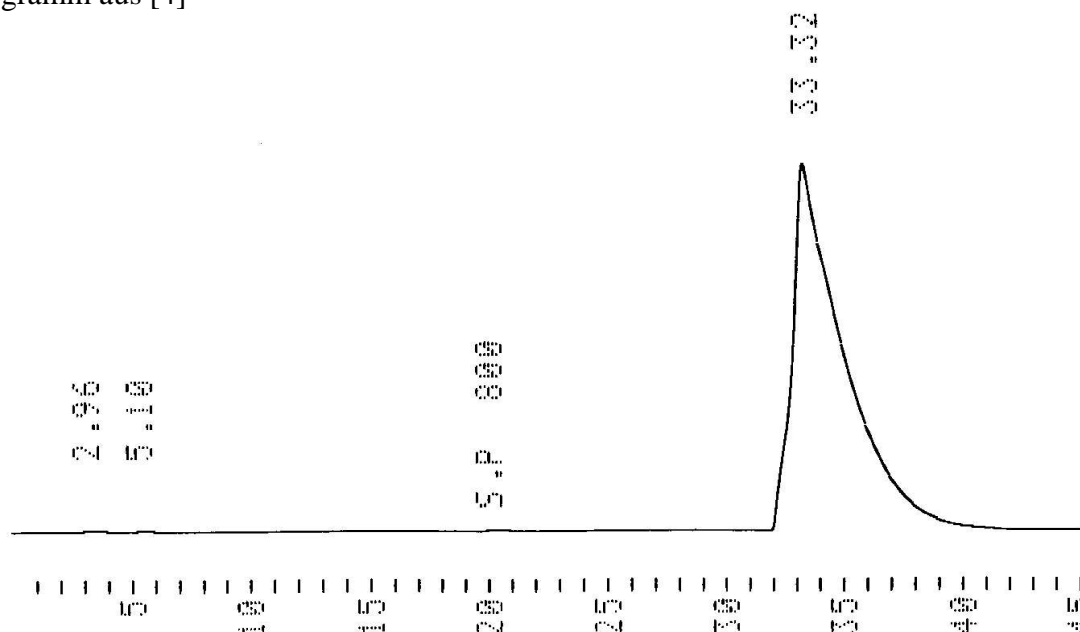
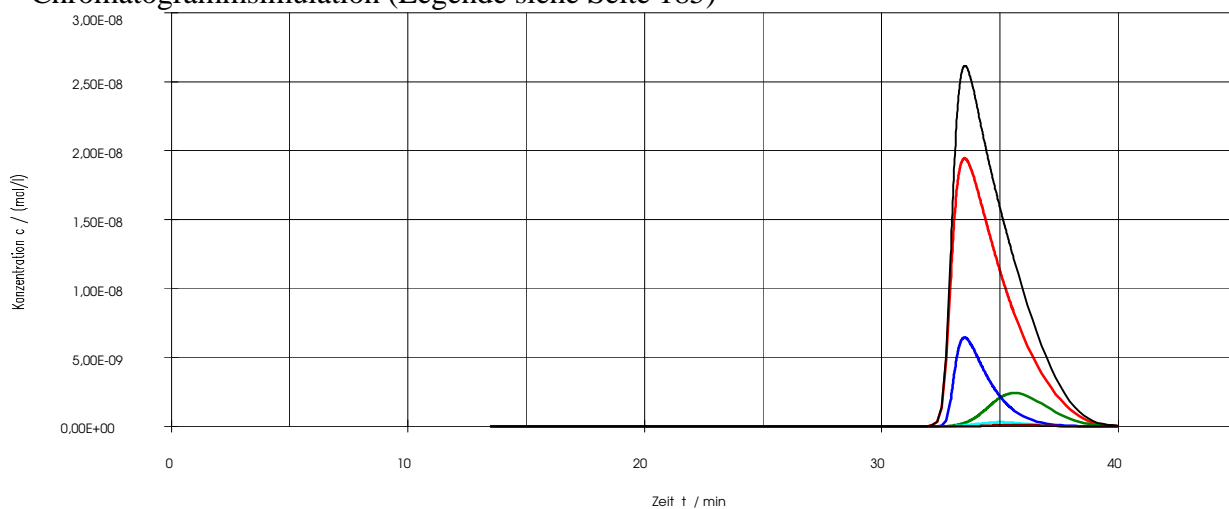


Abb. A66 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

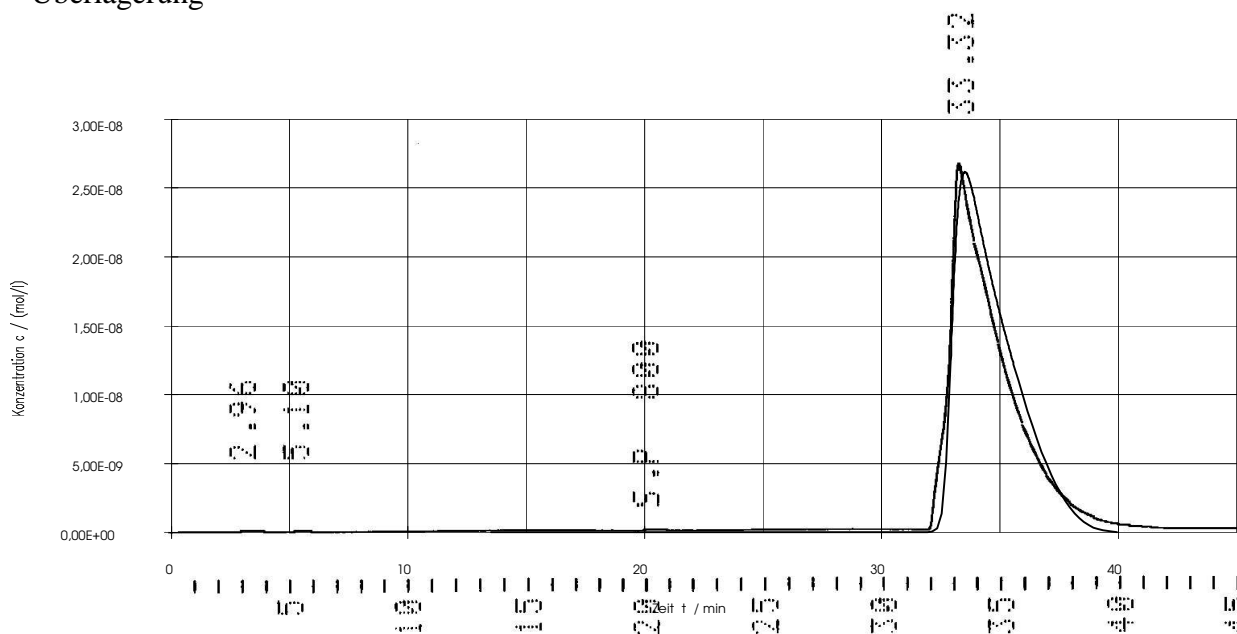
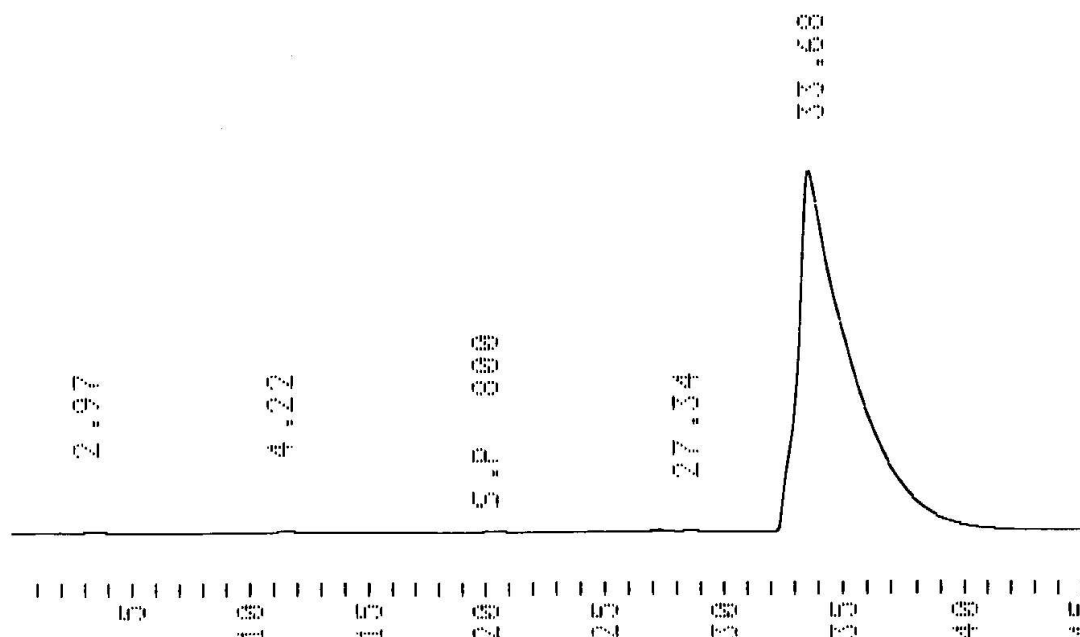
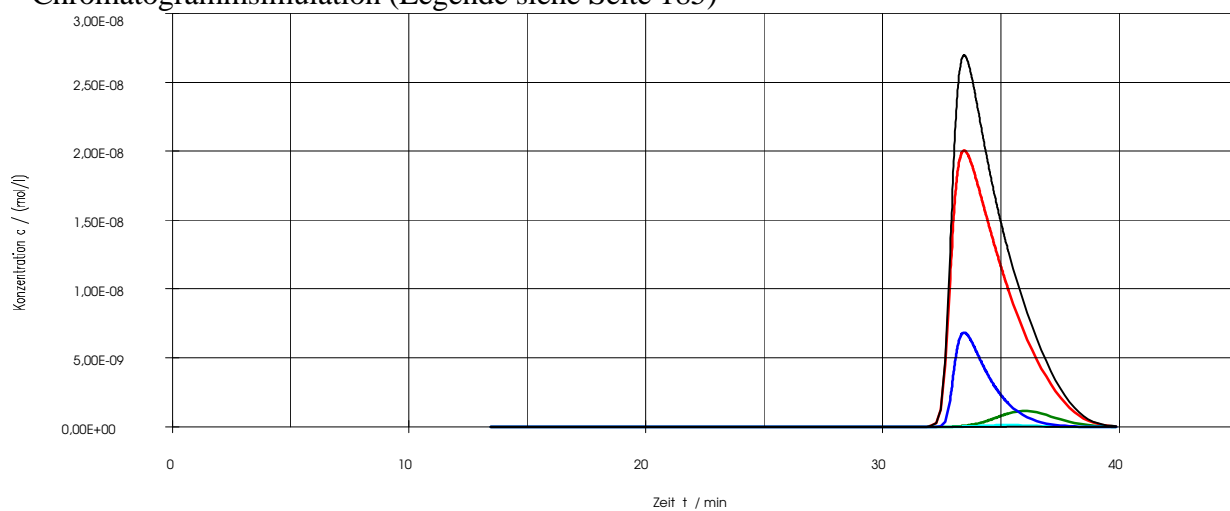


Abb. A67 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

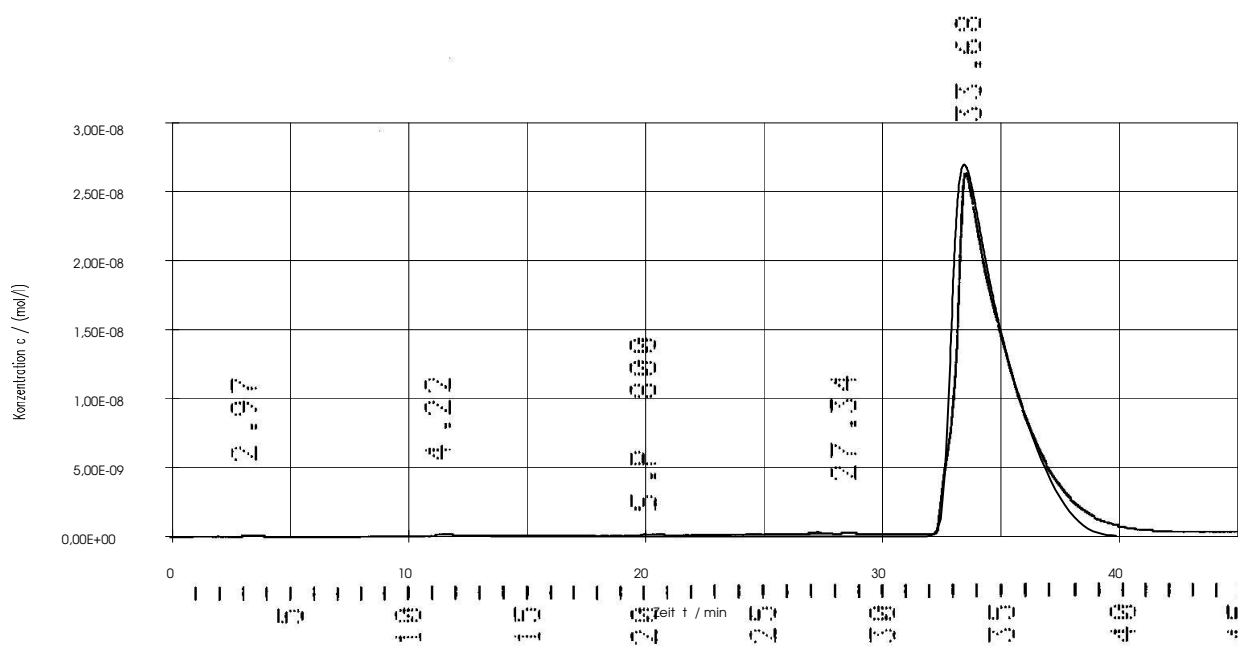
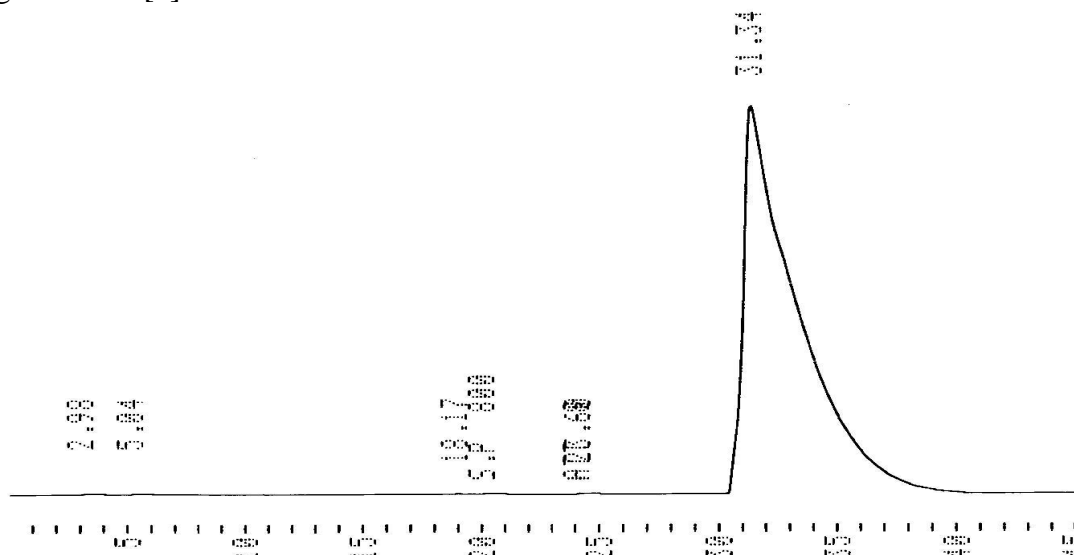
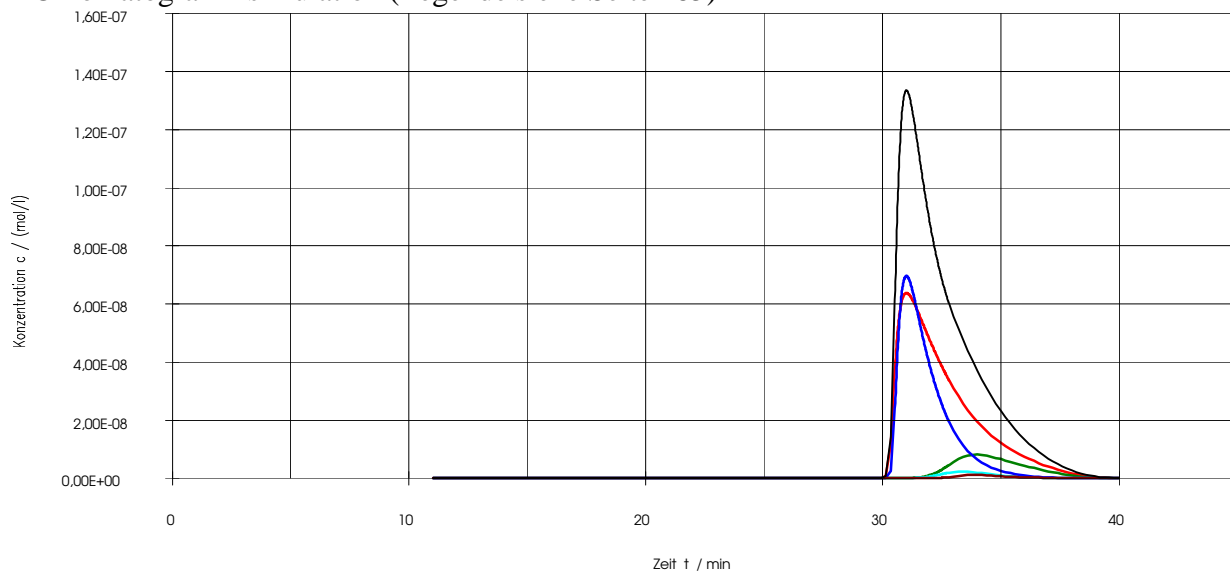


Abb. A68 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylester Aufgabe: 100µg, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

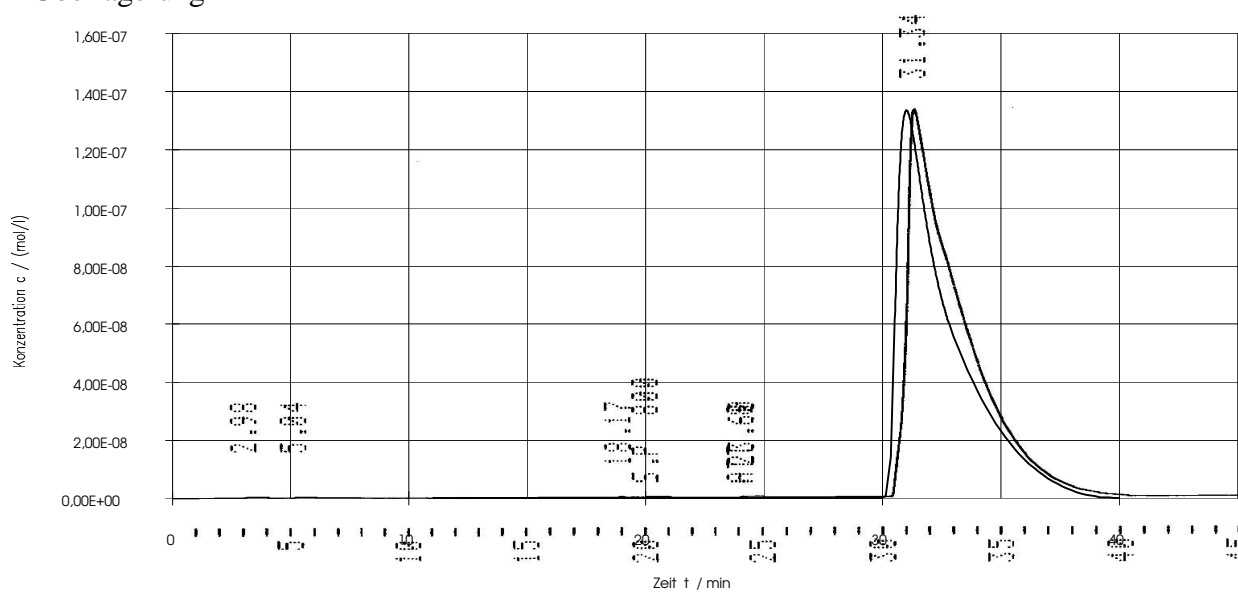
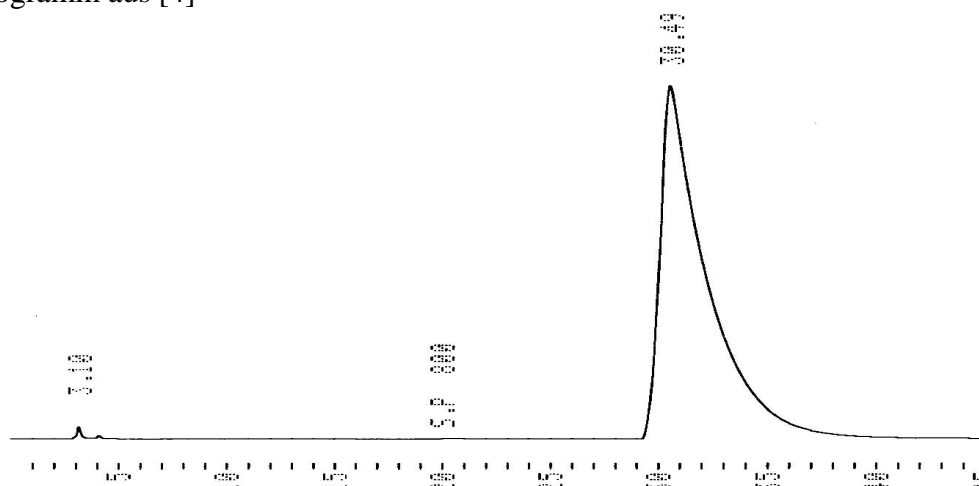
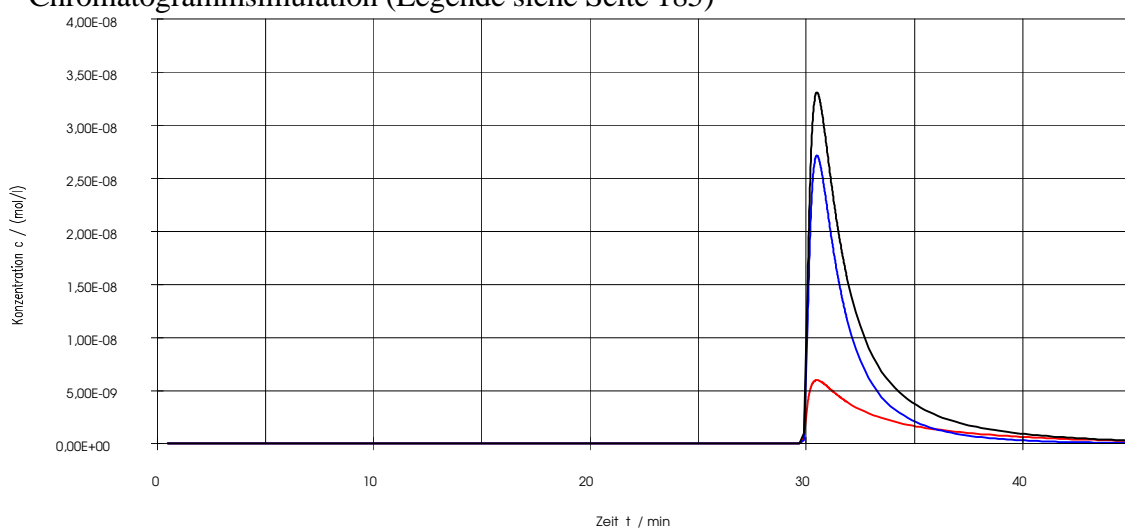


Abb. A69 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

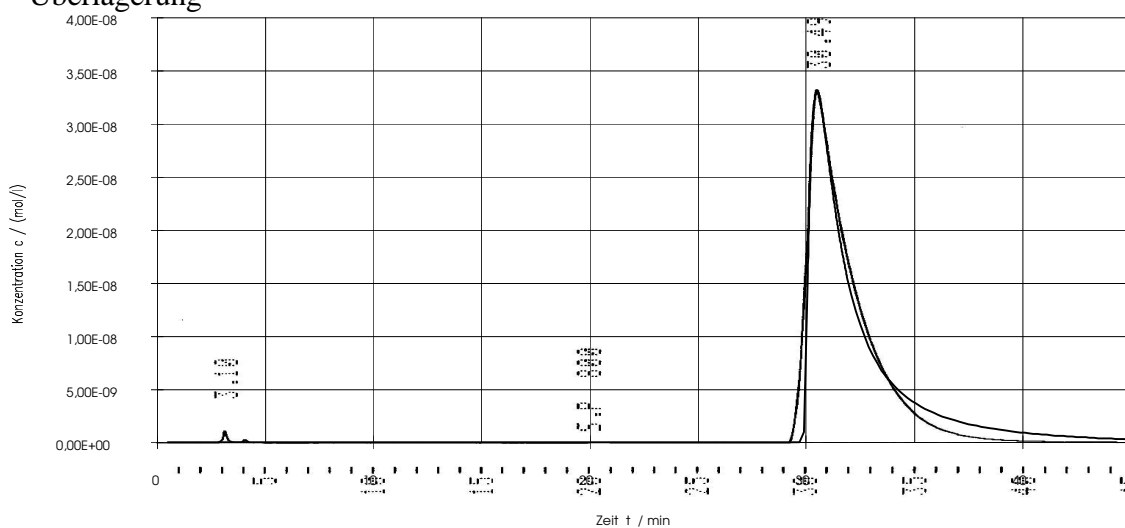
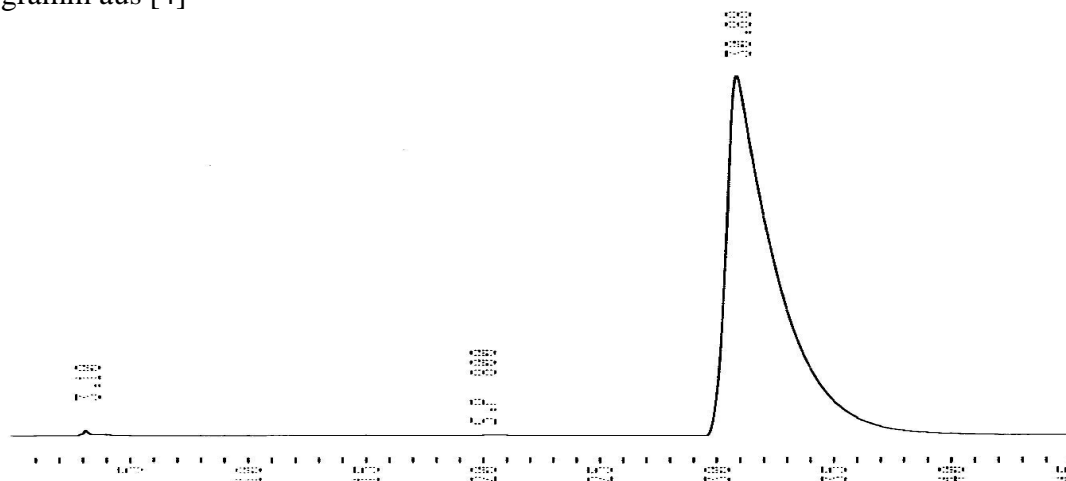
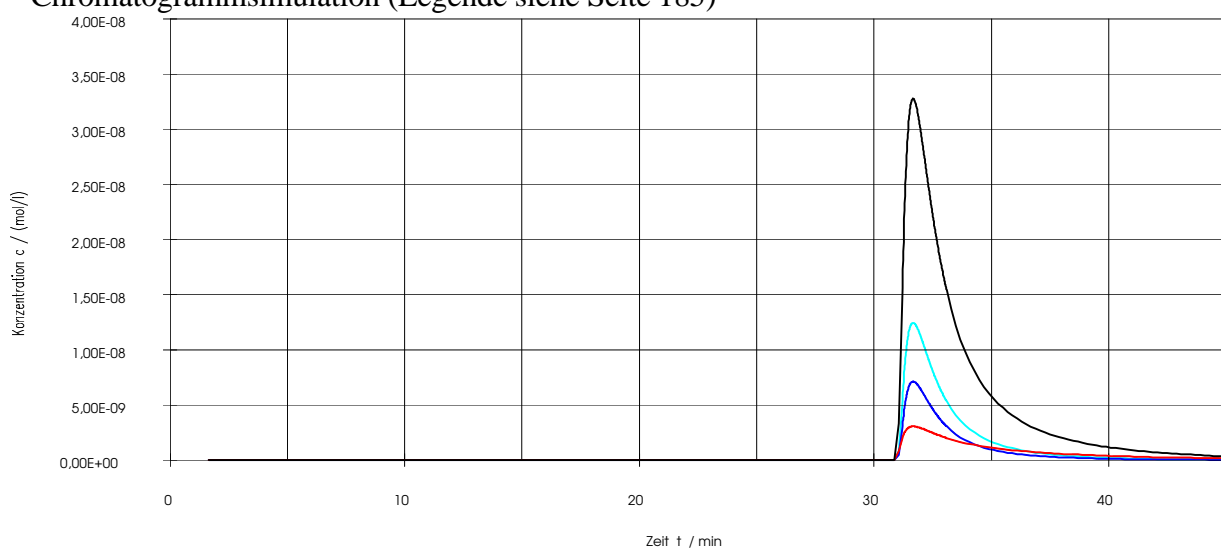


Abb. A70 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

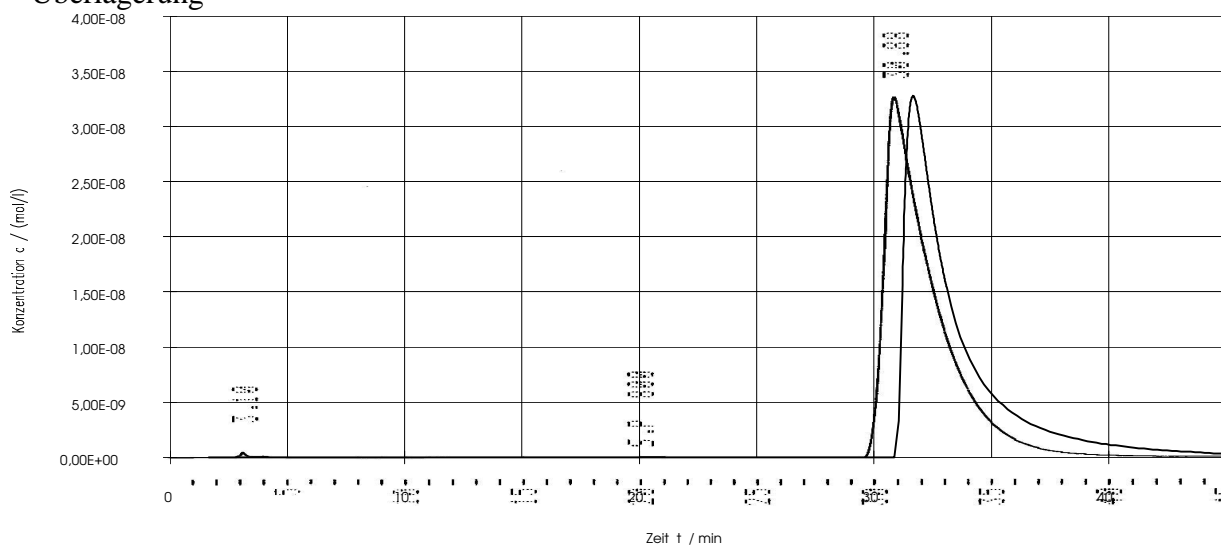
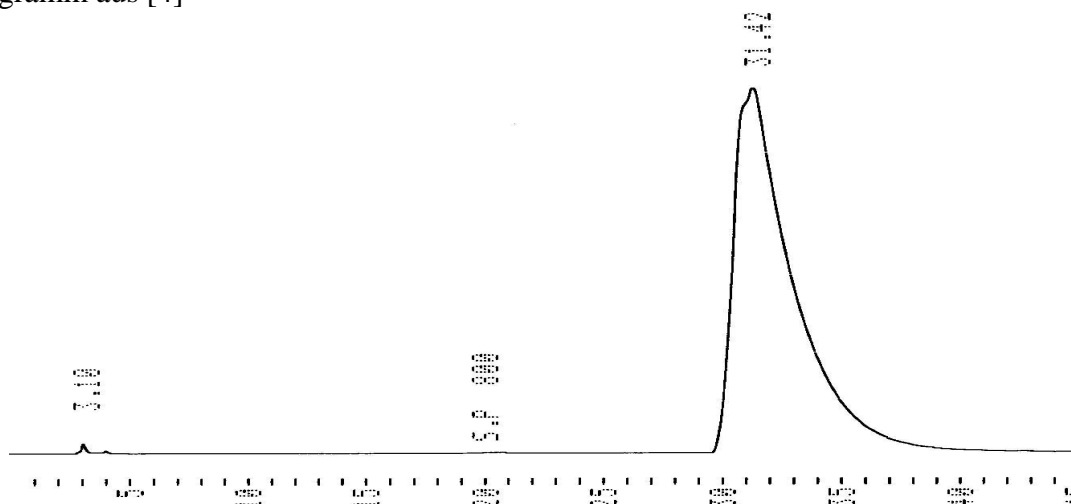
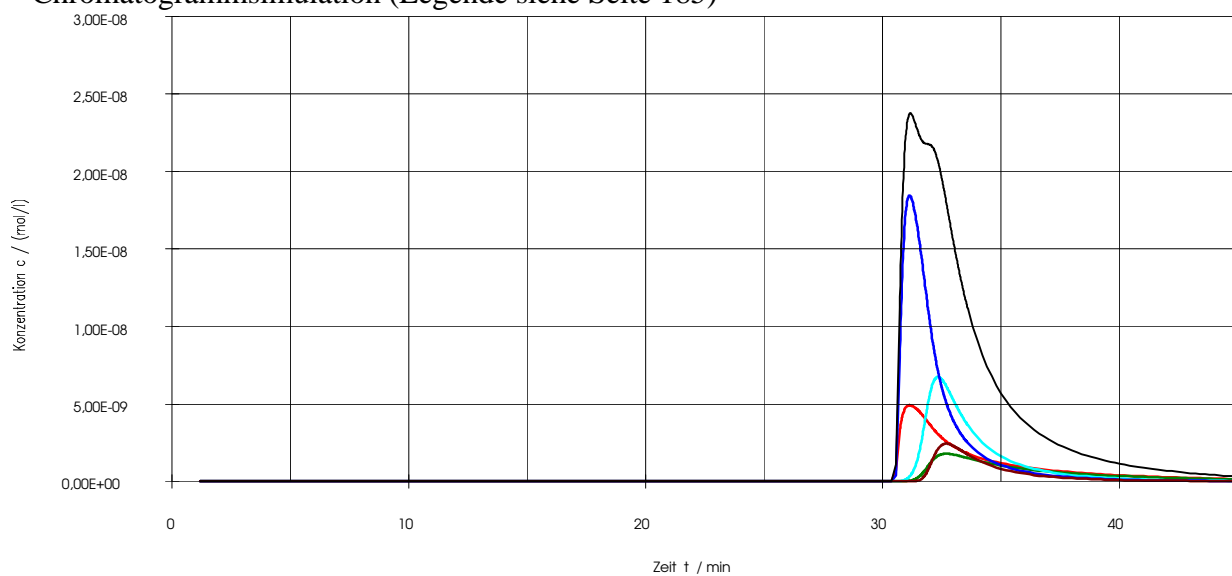




Abb. A71 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 40 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

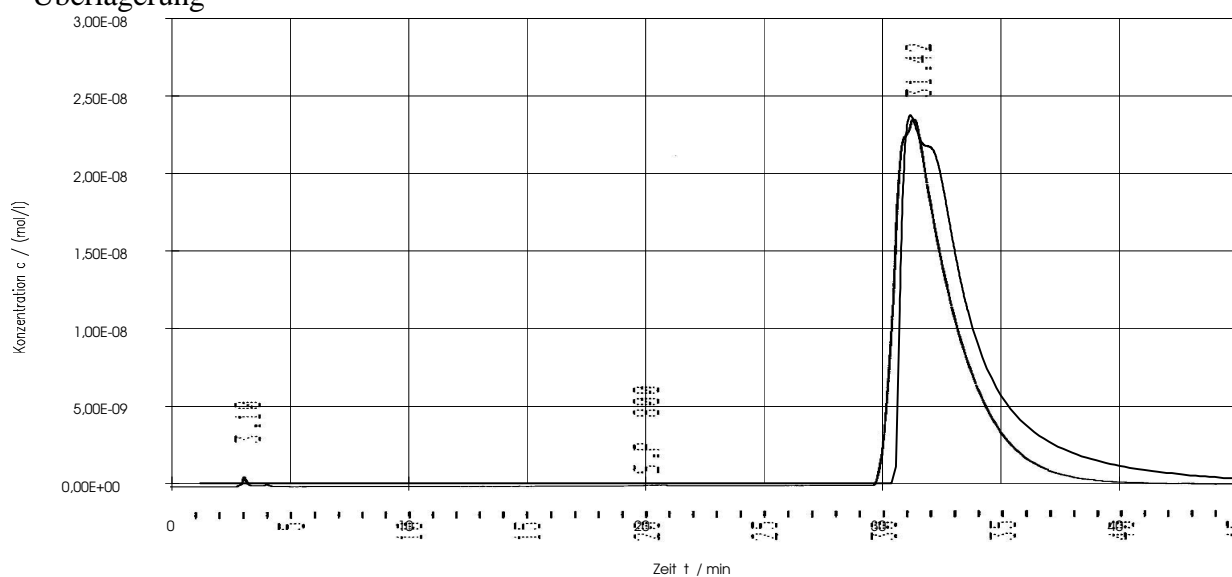
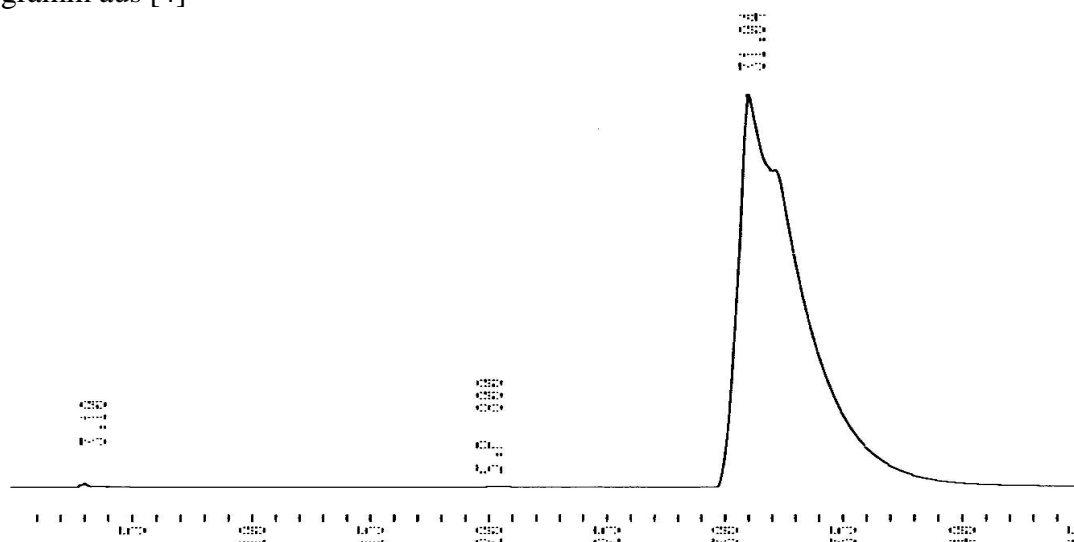
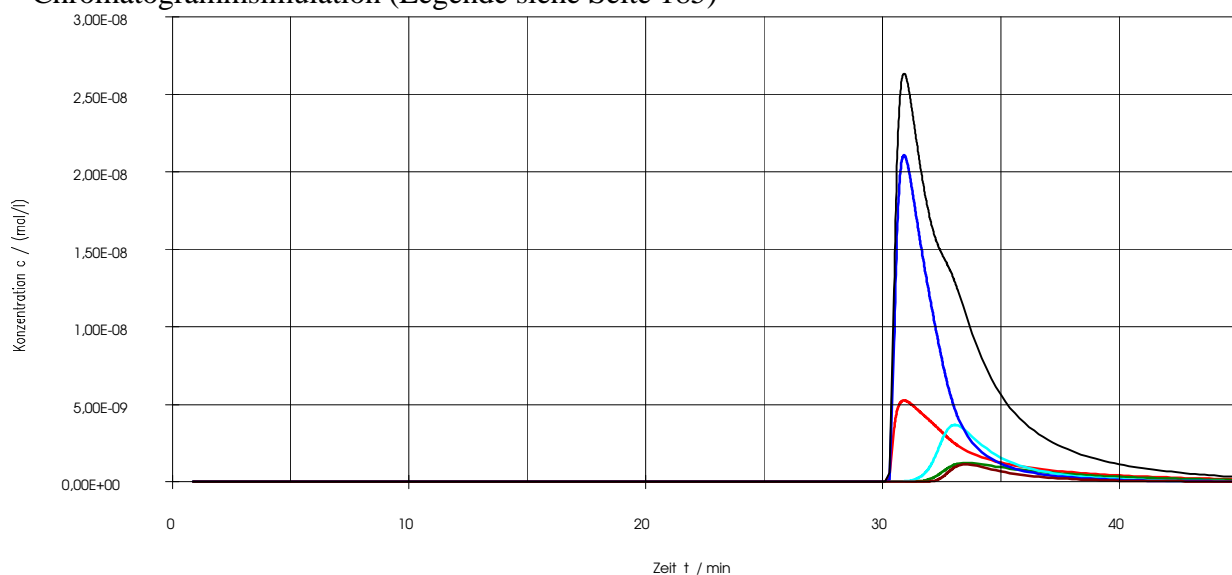


Abb. A72 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

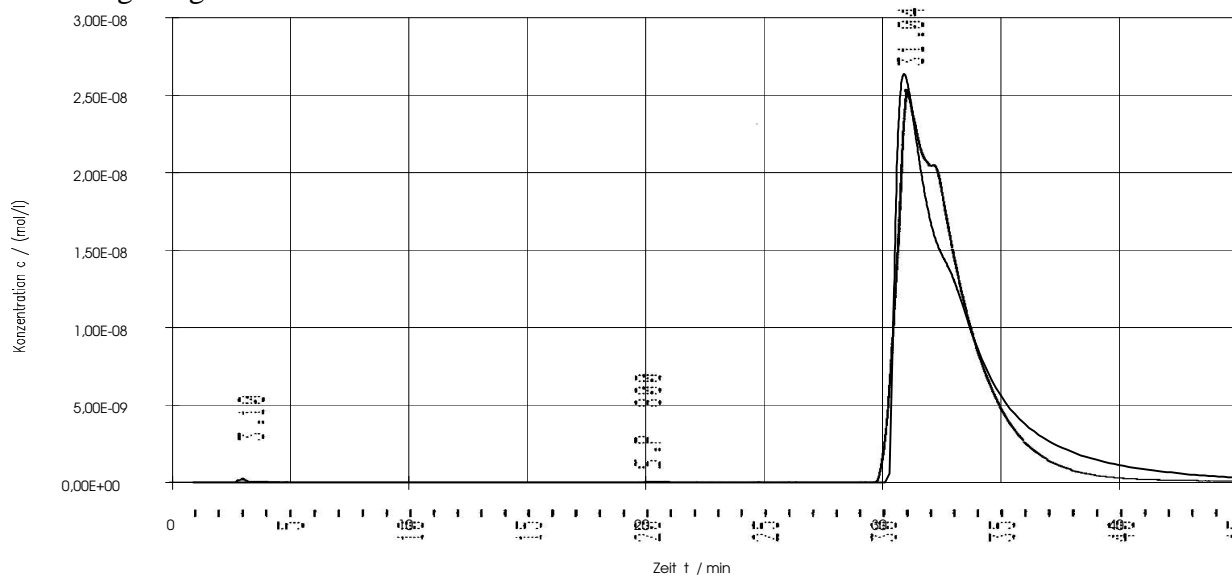
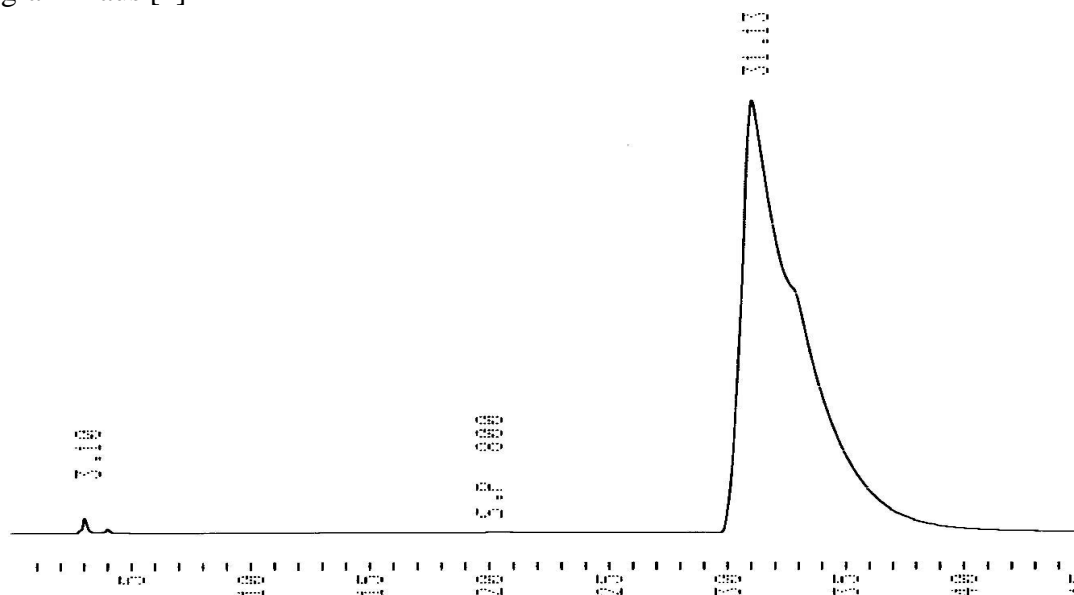
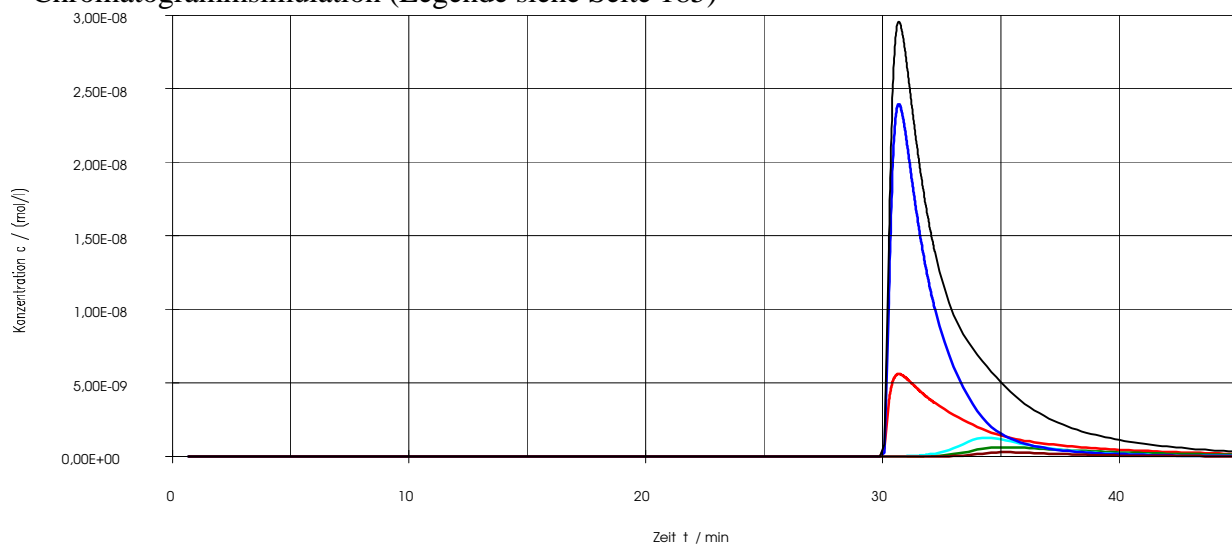


Abb. A73 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 20µg, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

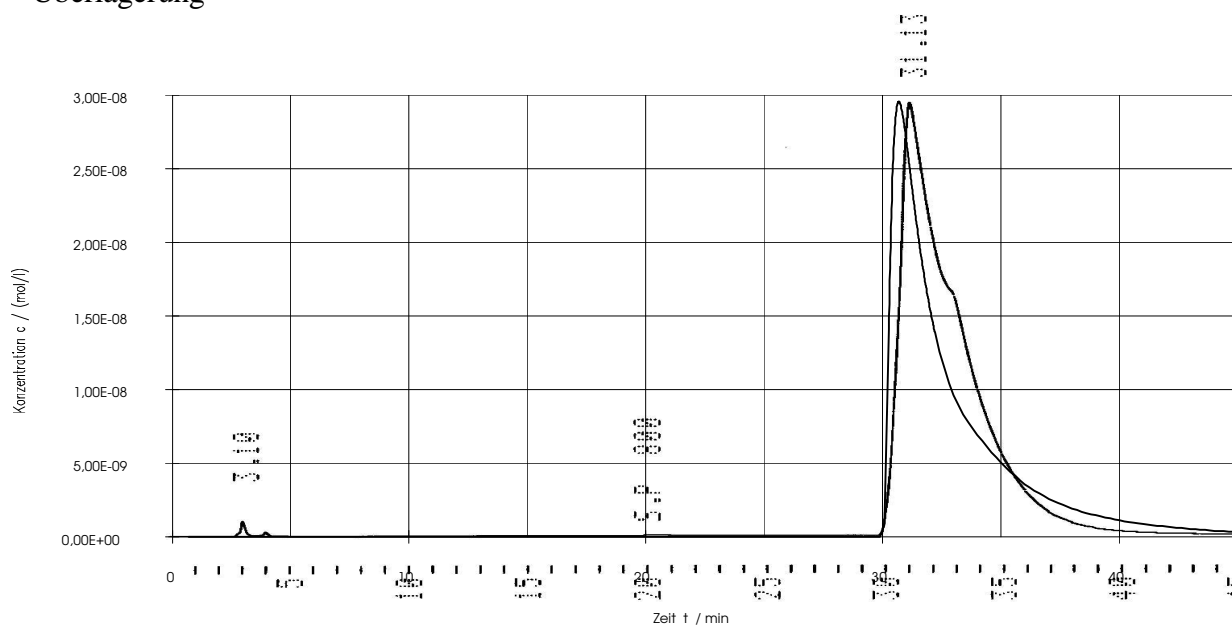
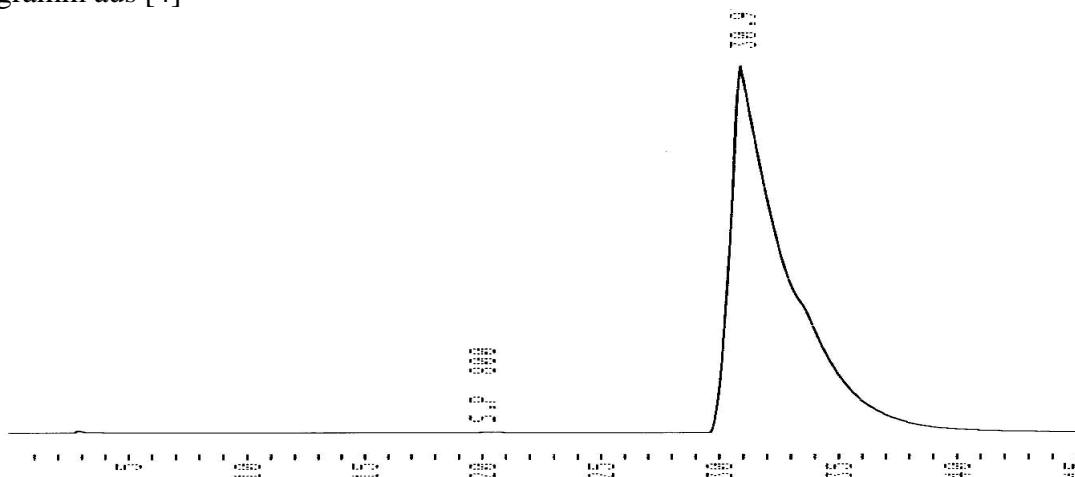
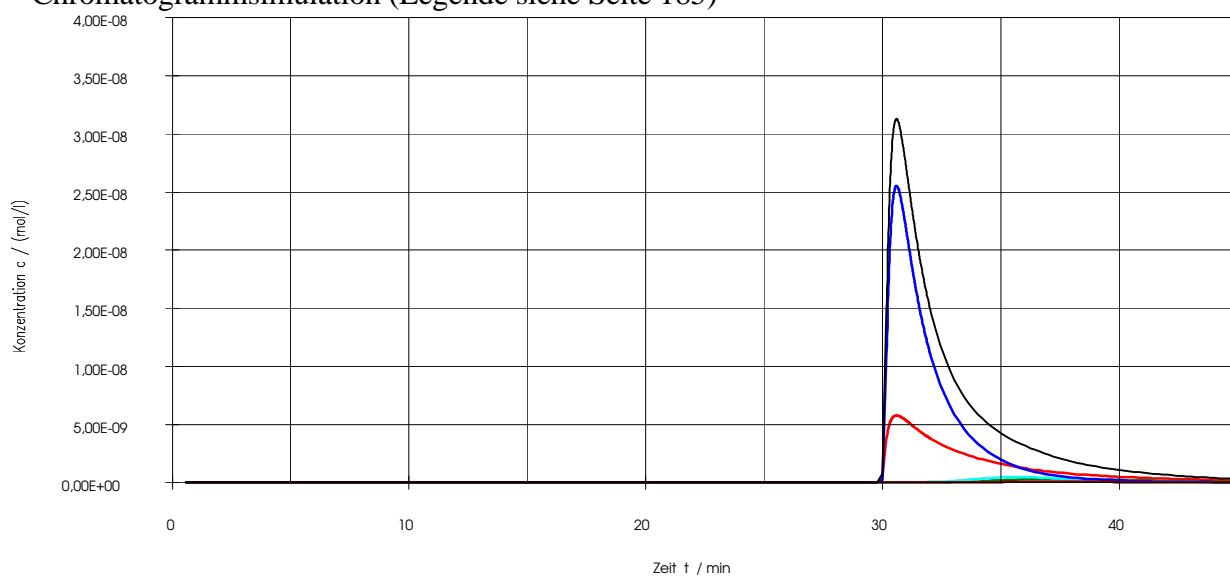


Abb. A74 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

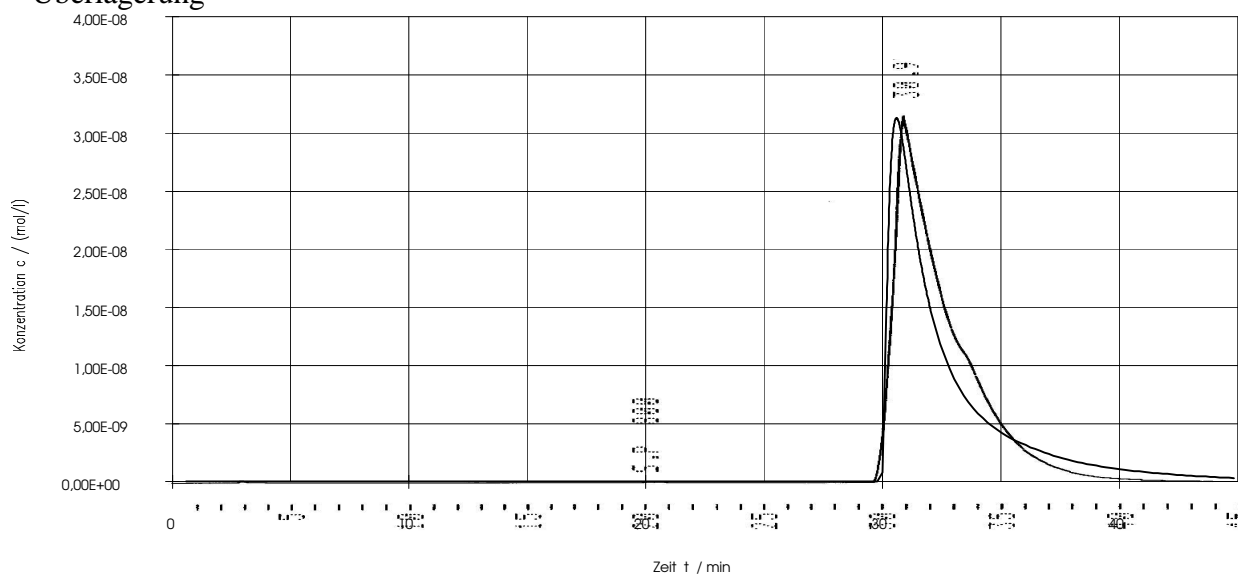
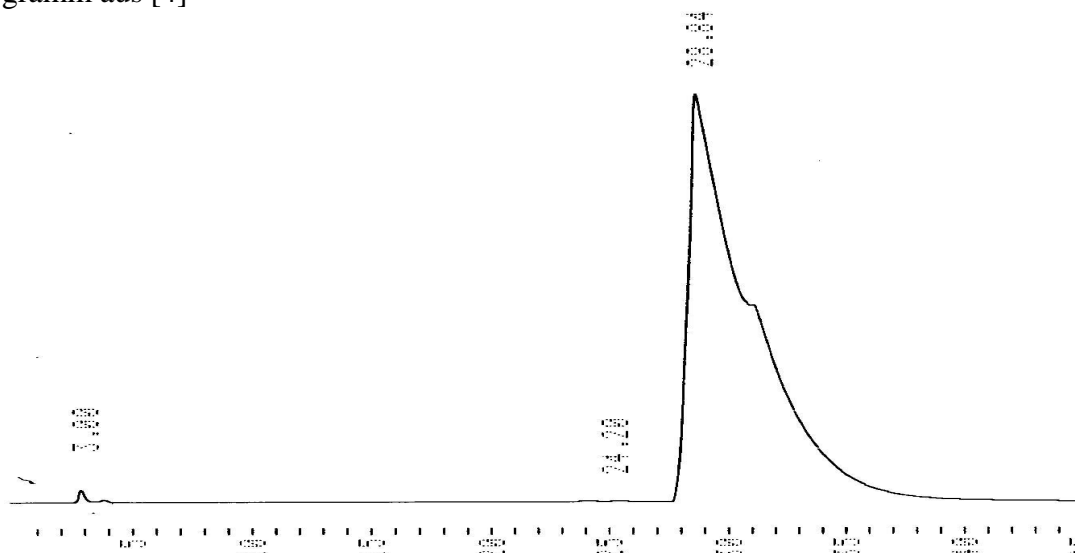
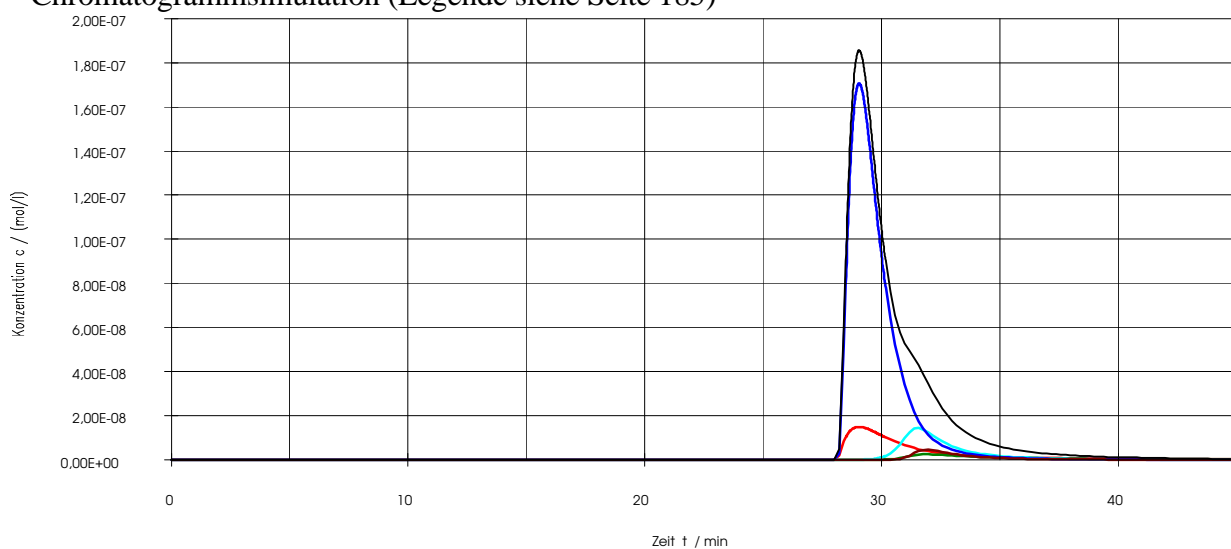


Abb. A75 : N-Benzoyl-threoninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

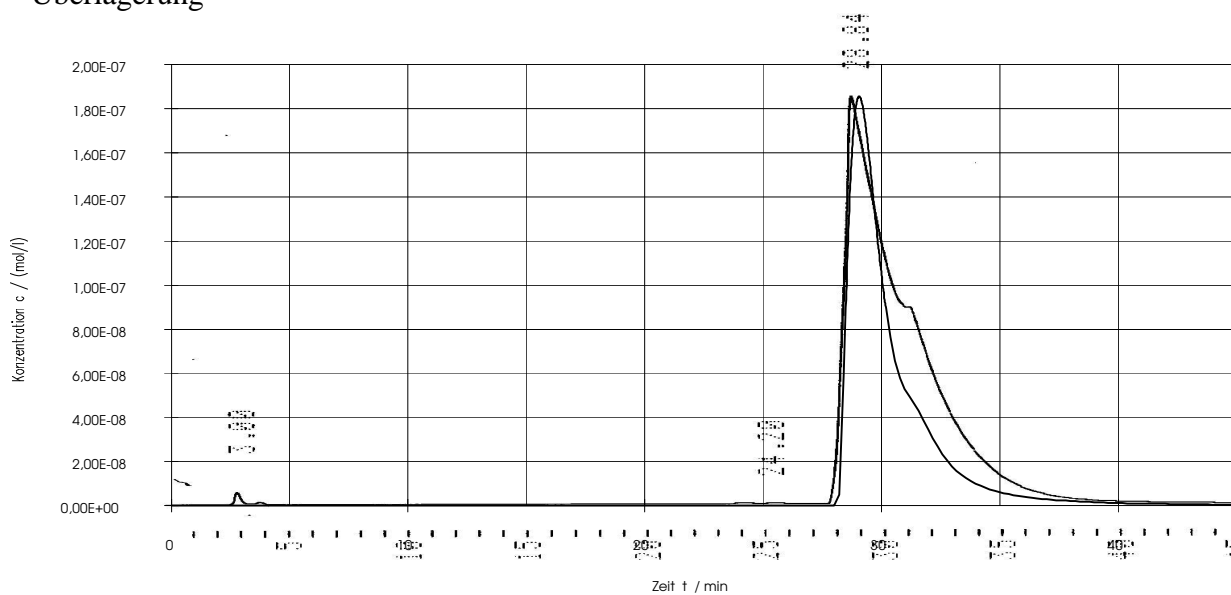
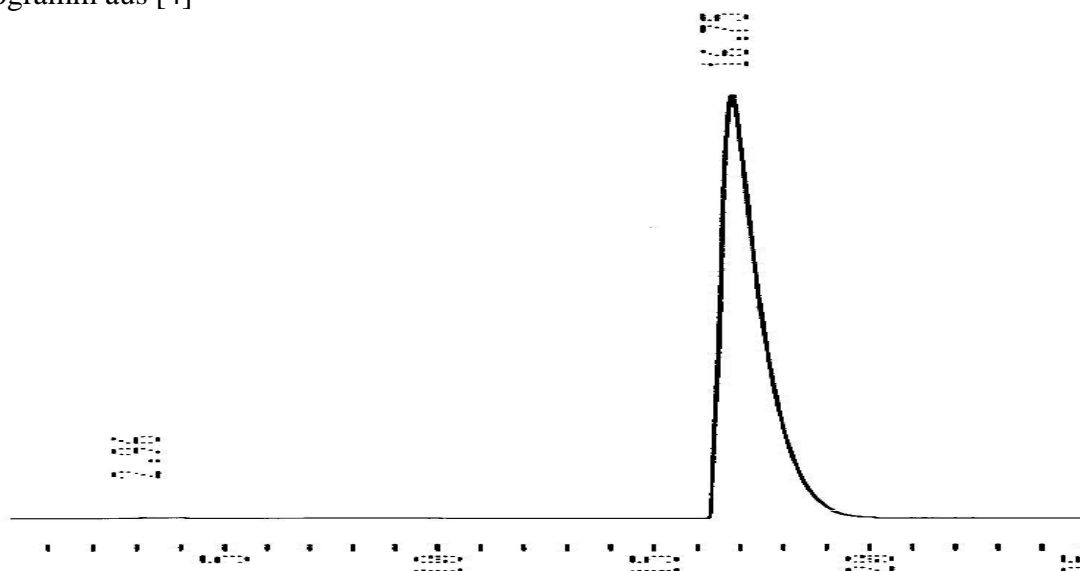
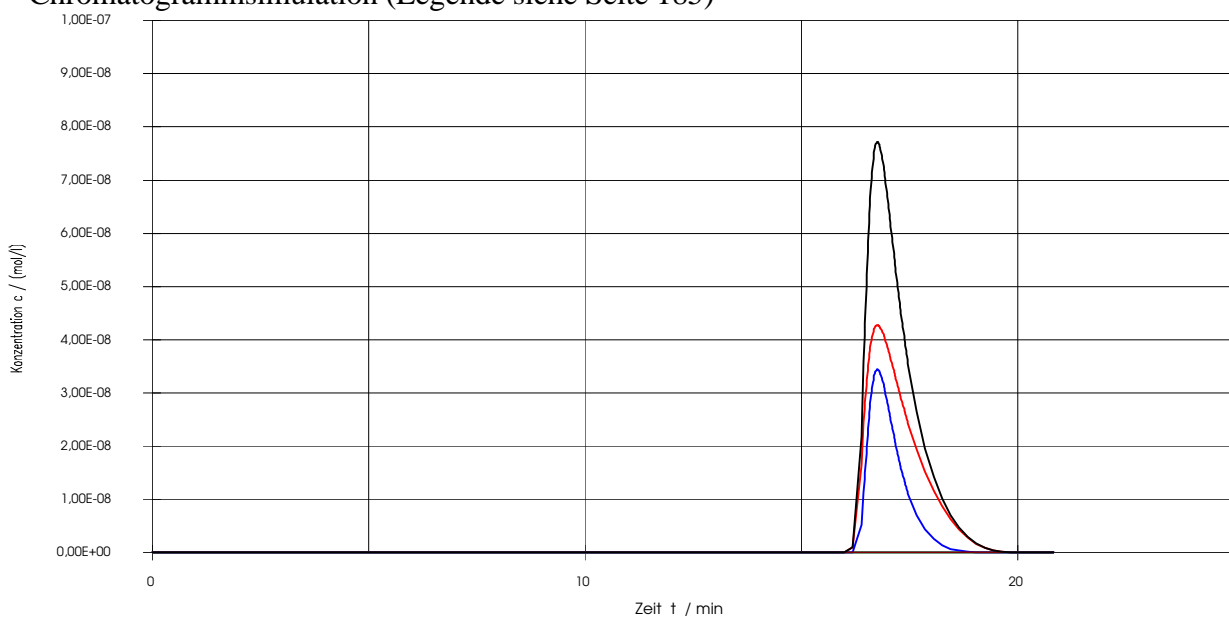


Abb. A76 : N-Benzoyl-valinmethylester Aufgabe: 20µg, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

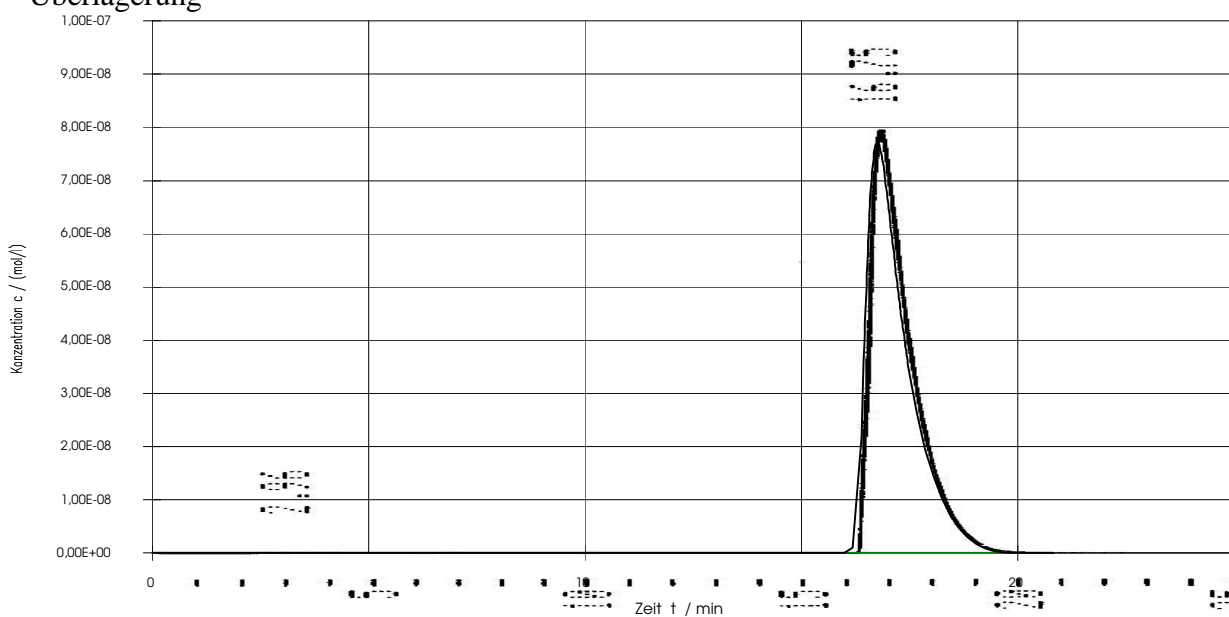
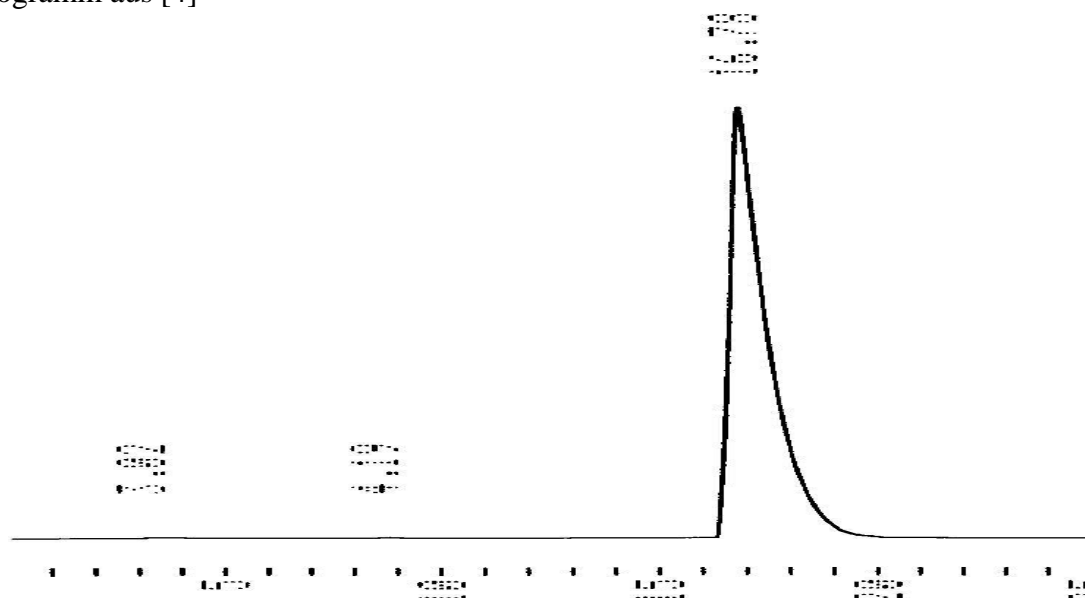
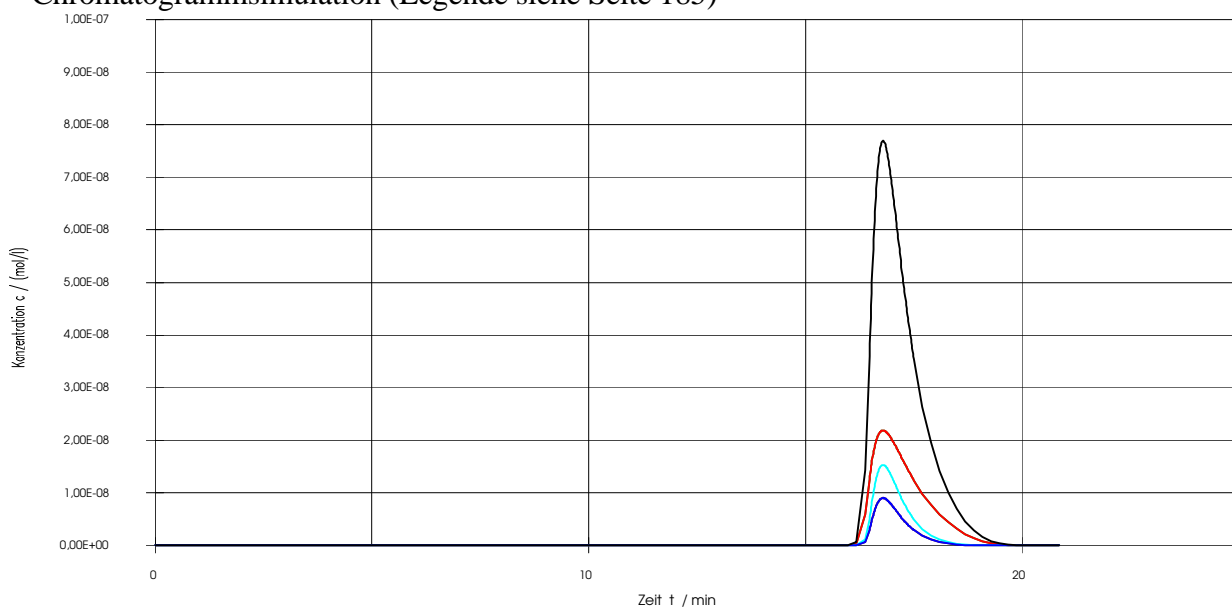


Abb. A77 : N-Benzoyl-valinmethylester Aufgabe: 20µg, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

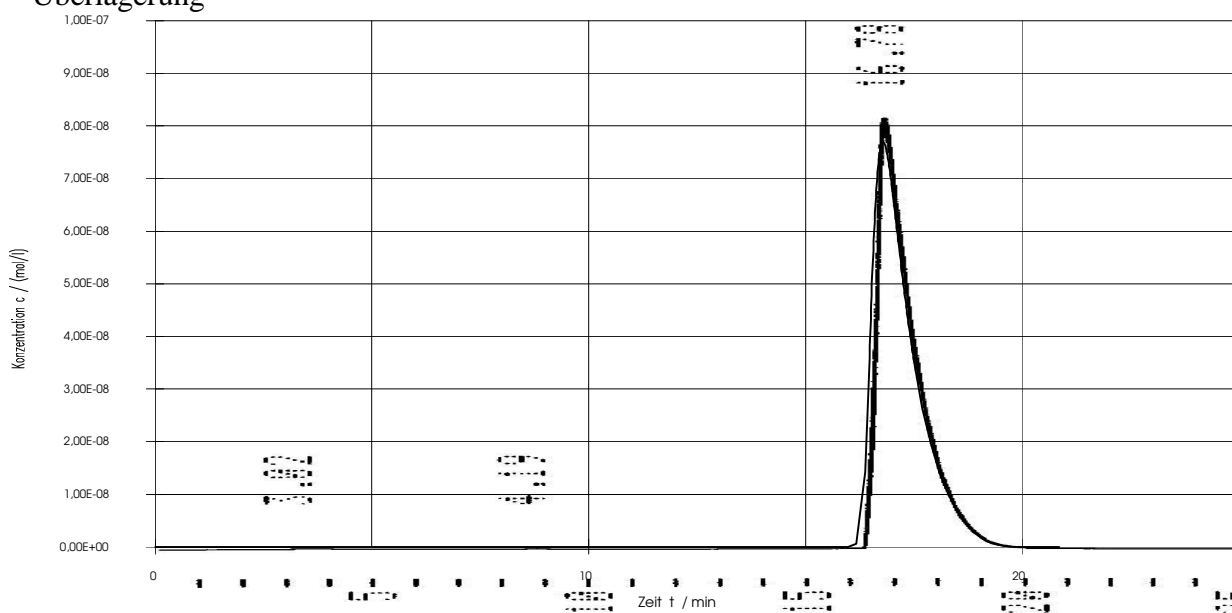
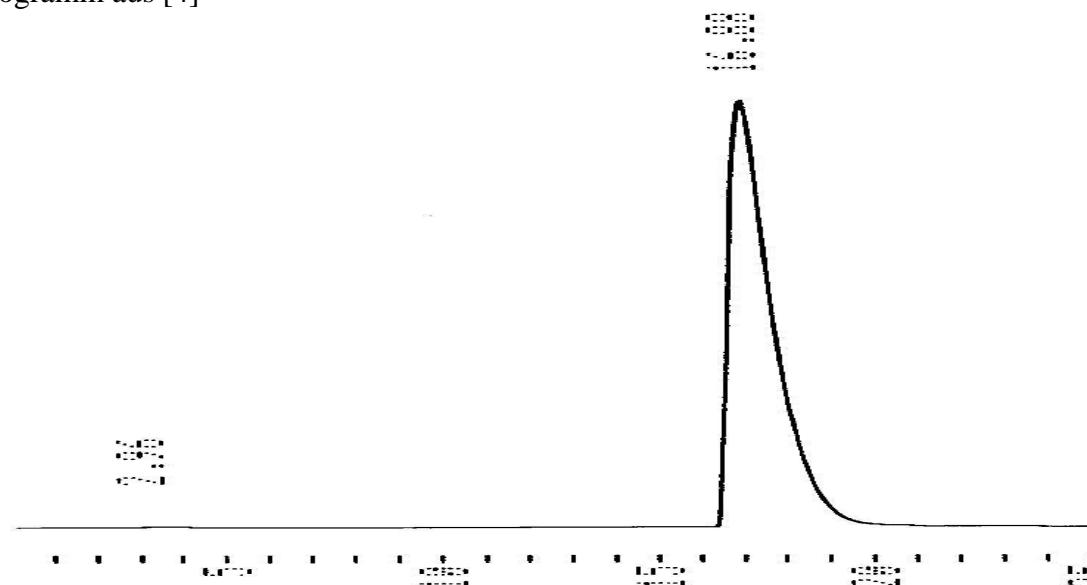
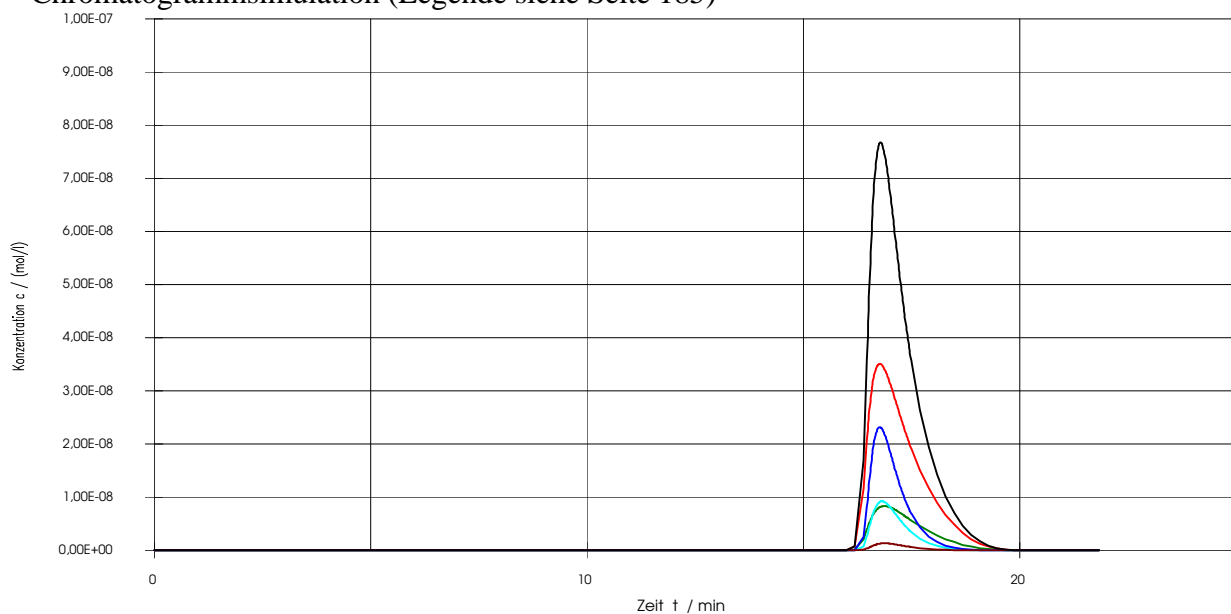


Abb. A78 : N-Benzoyl-valinmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

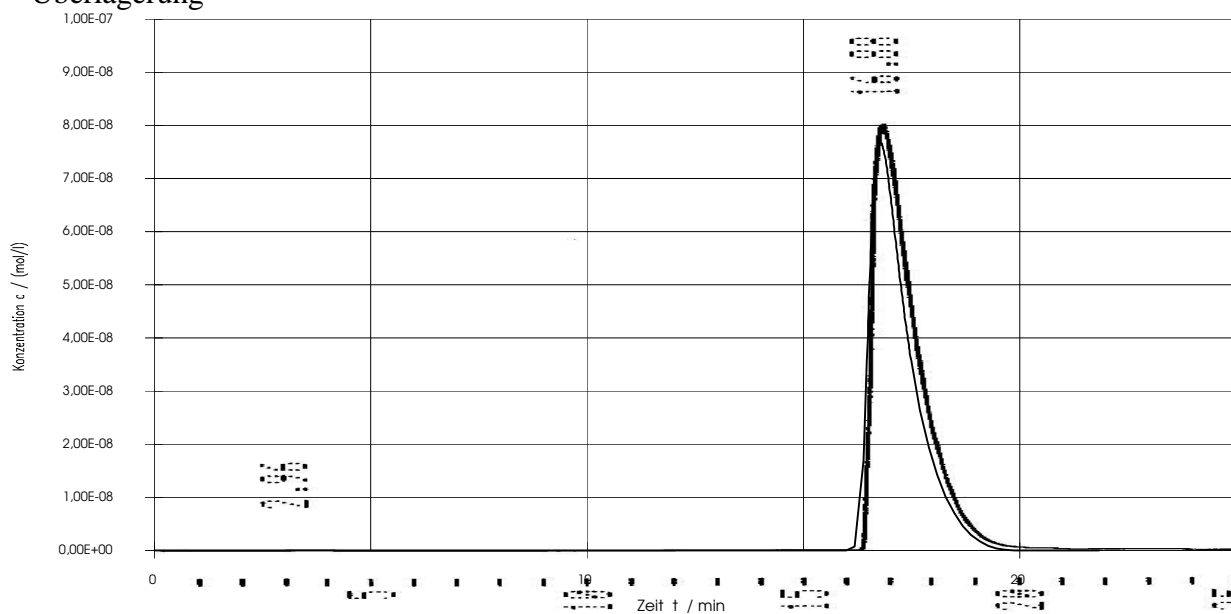
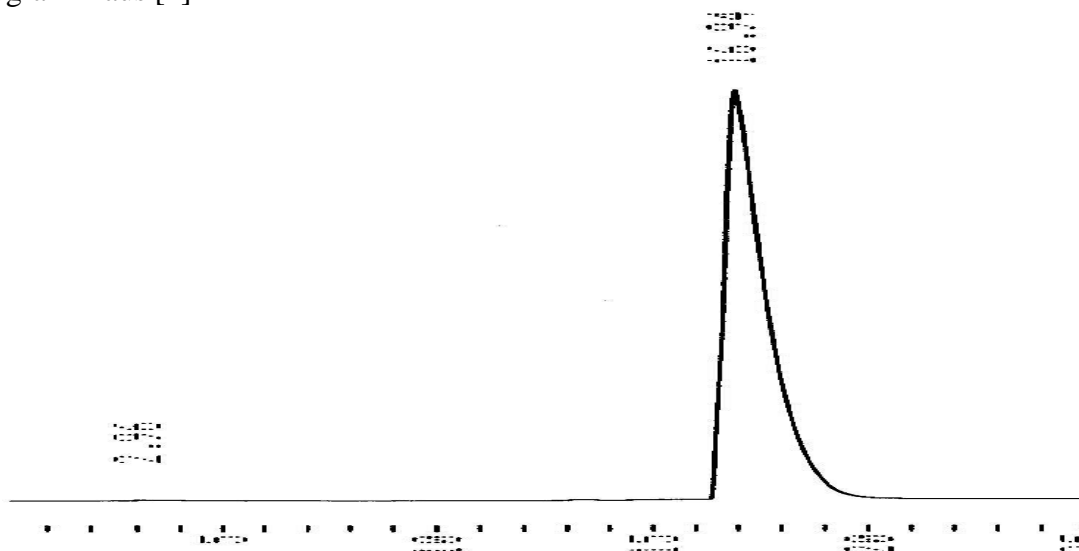
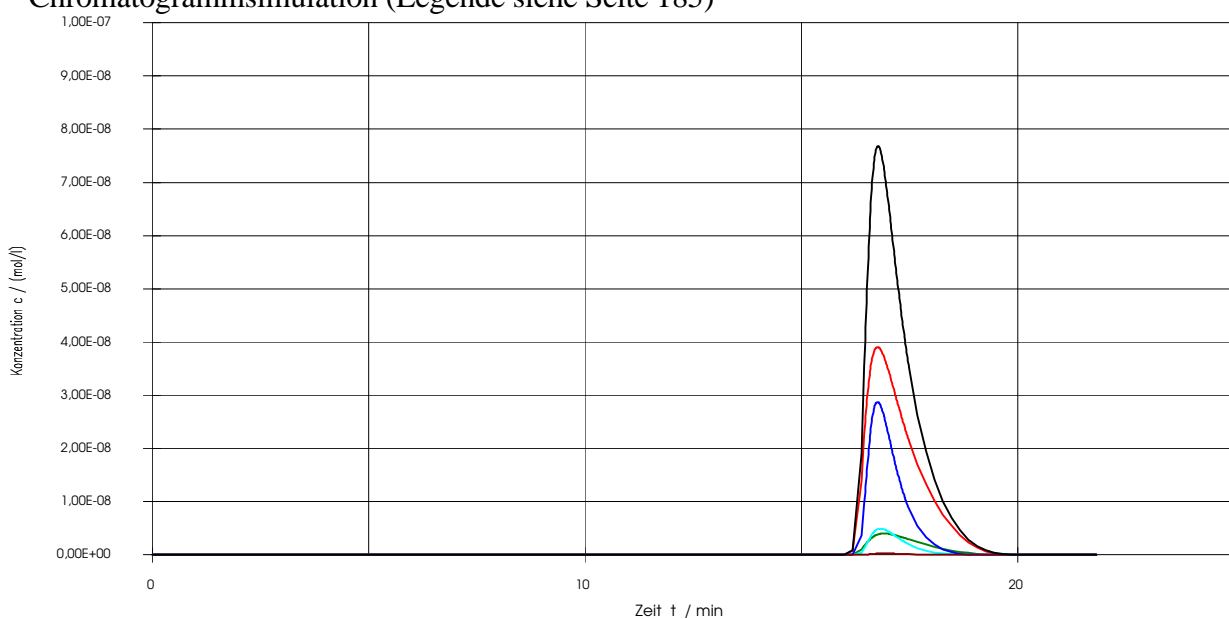




Abb. A79 : N-Benzoyl-valinmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

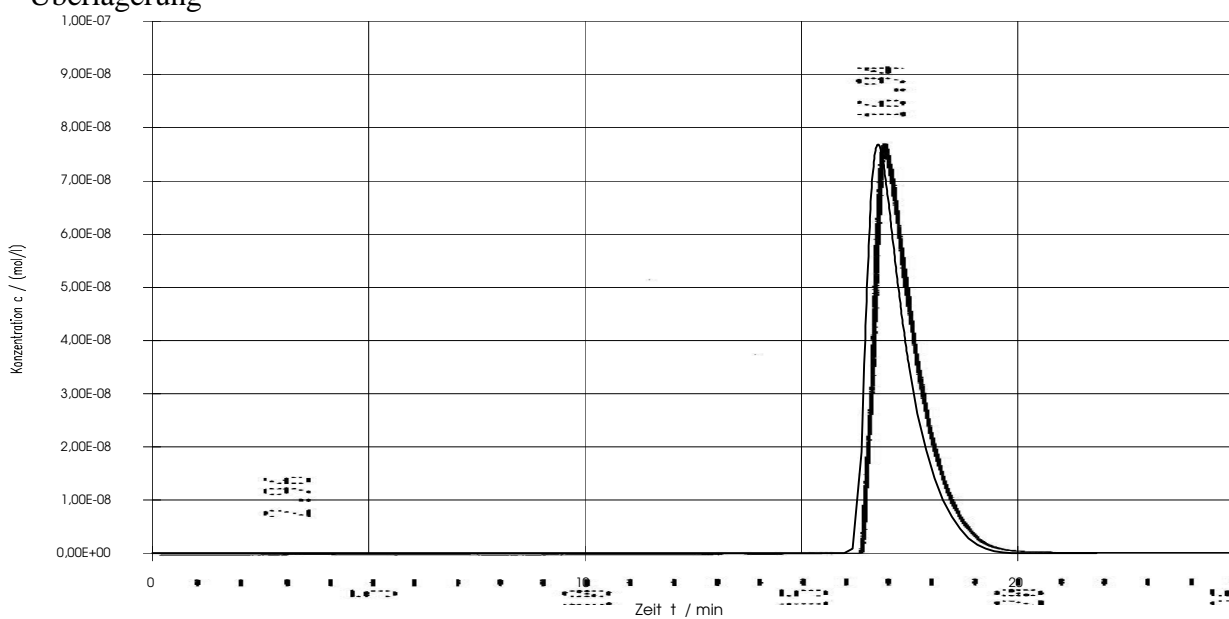
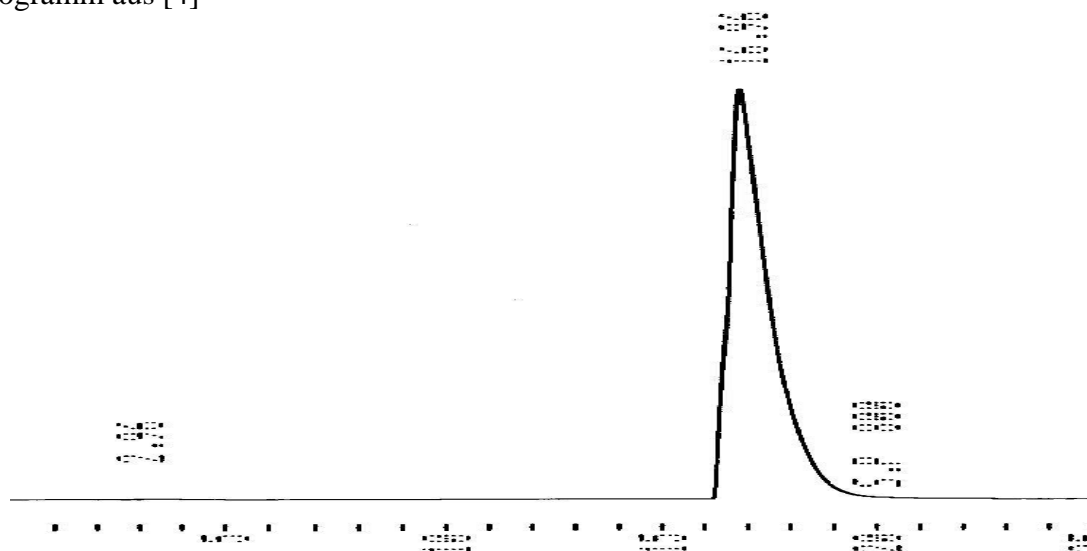
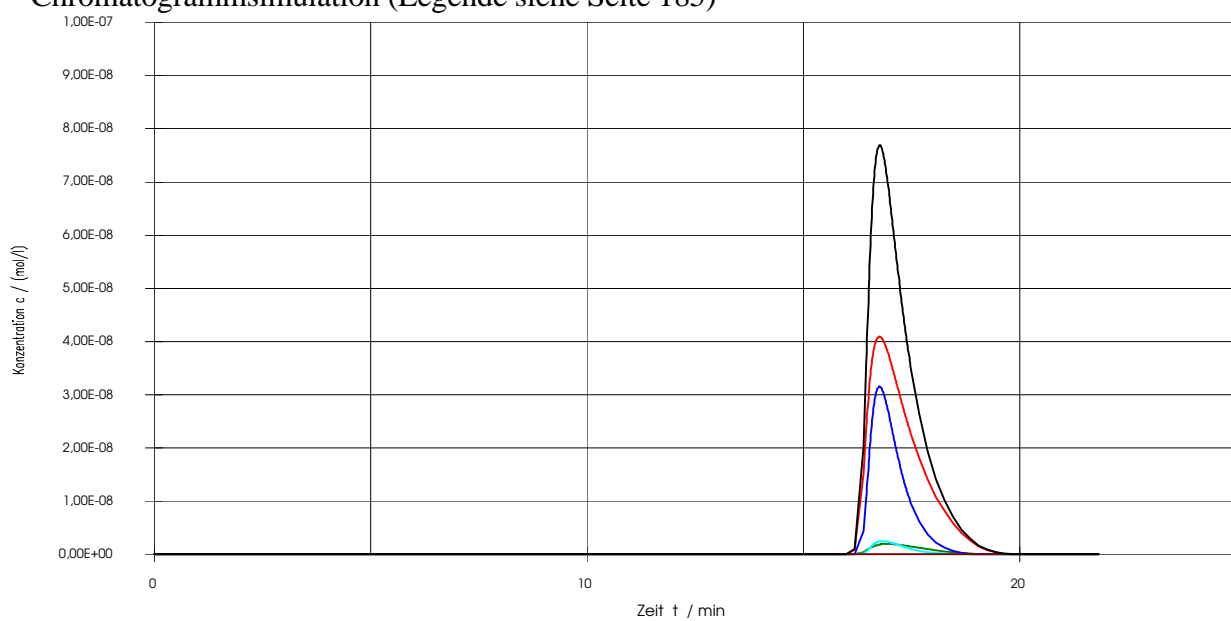


Abb. A80 : N-Benzoyl-valinmethylester Aufgabe: 20µg, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

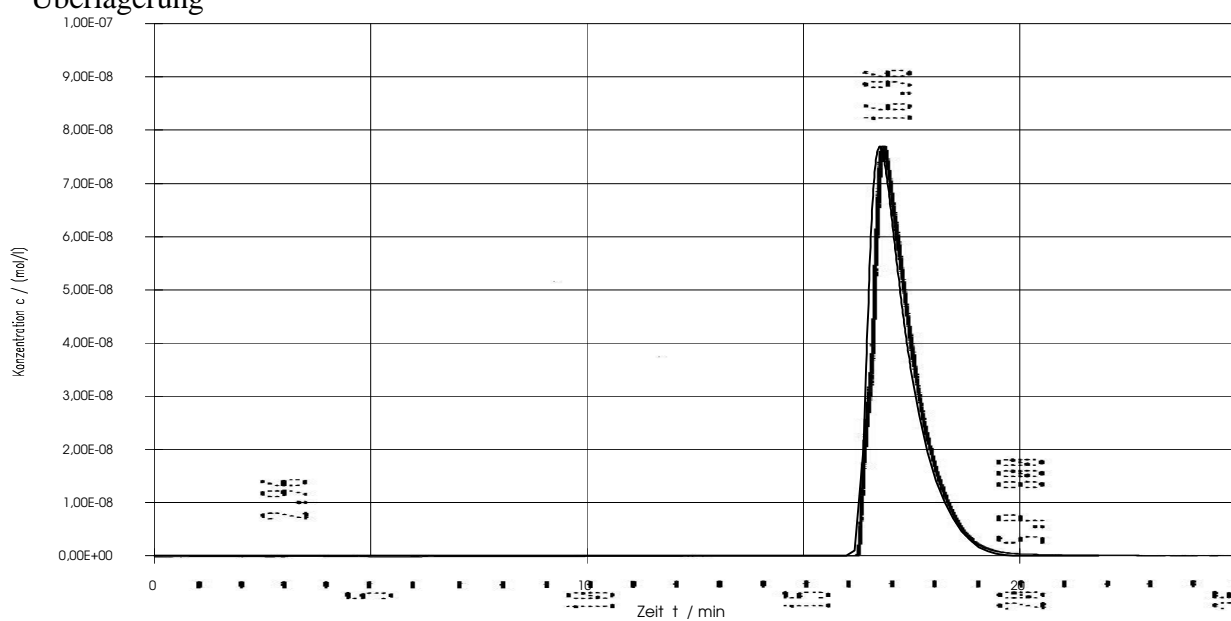
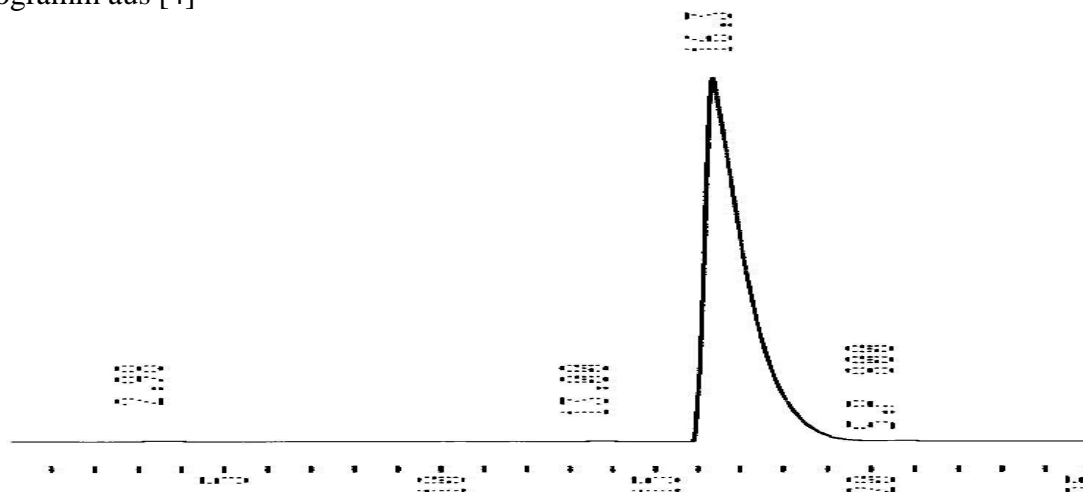
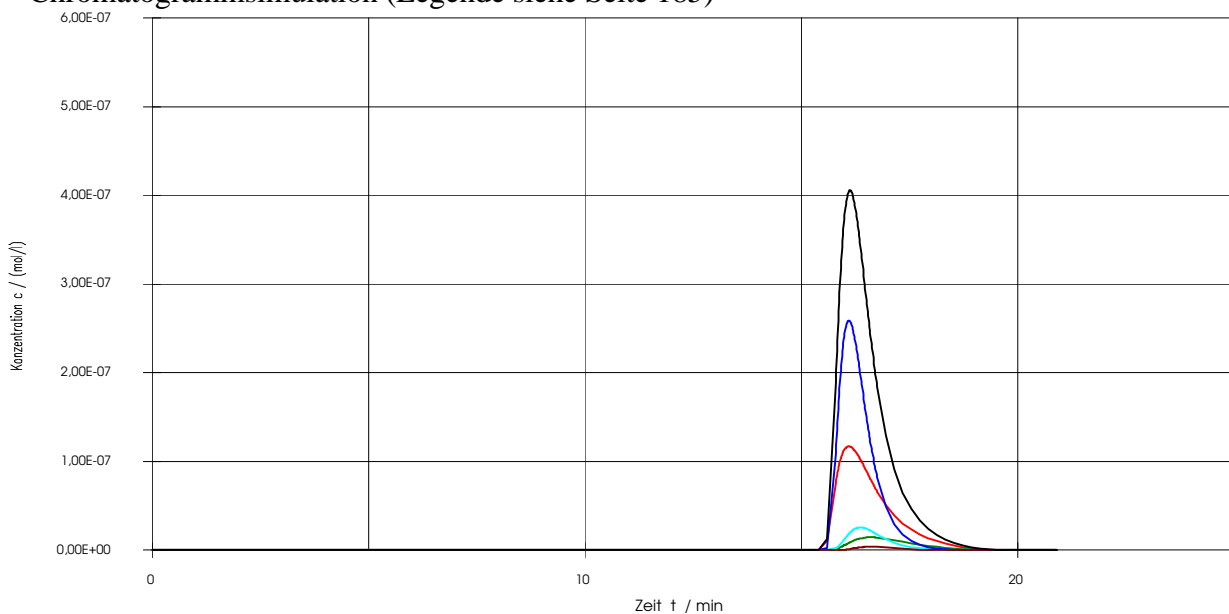


Abb. A81 : N-Benzoyl-valinmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

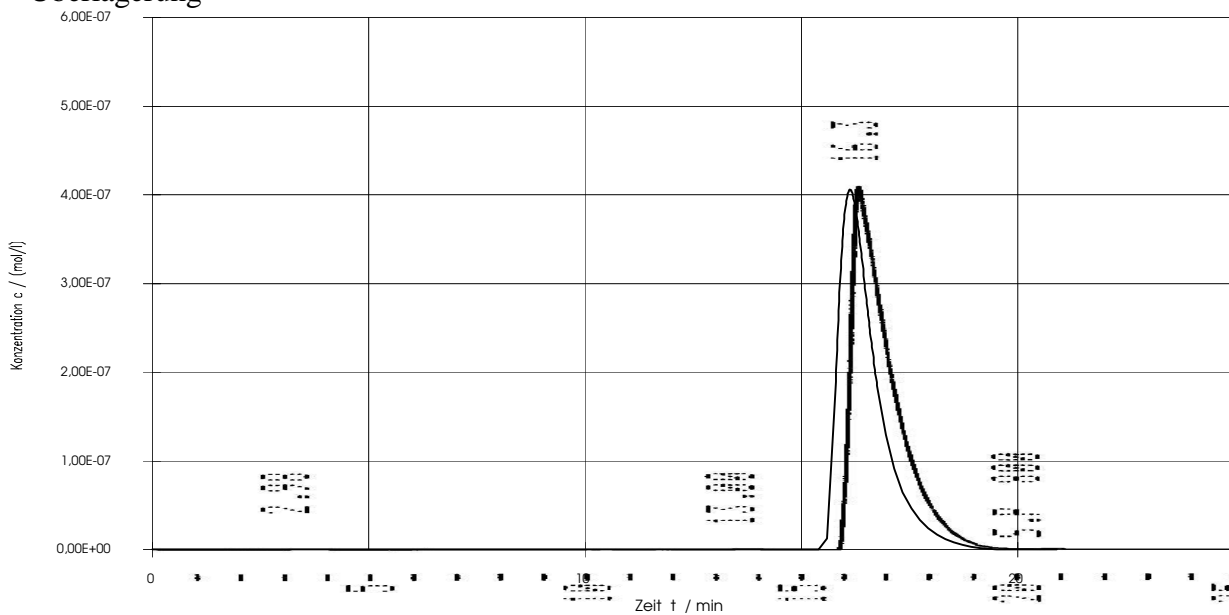
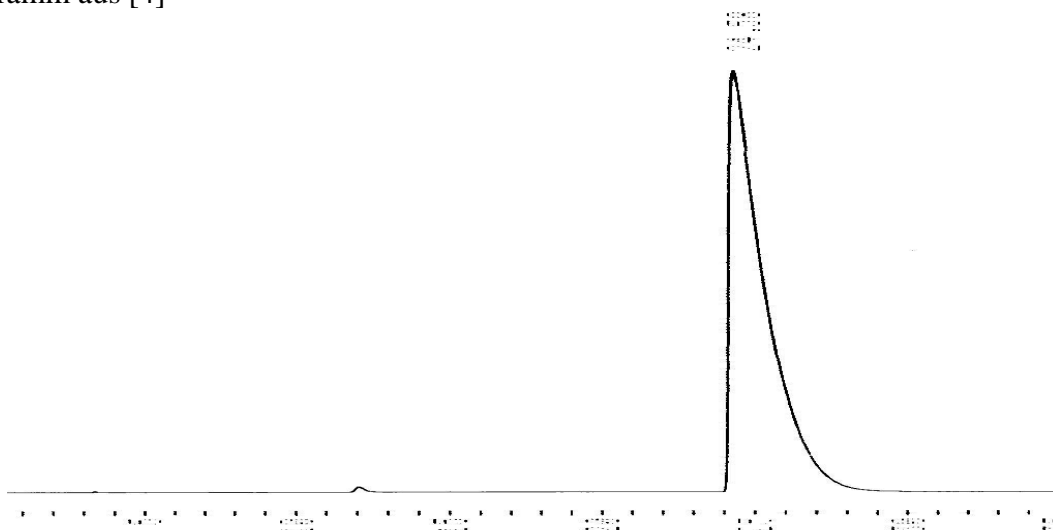
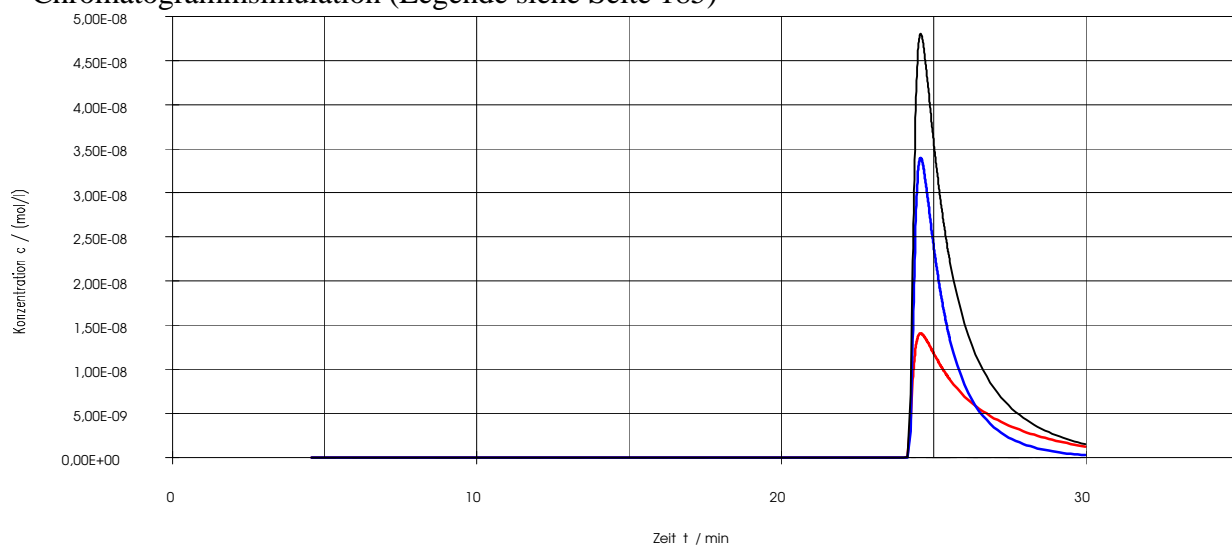


Abb. A82 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

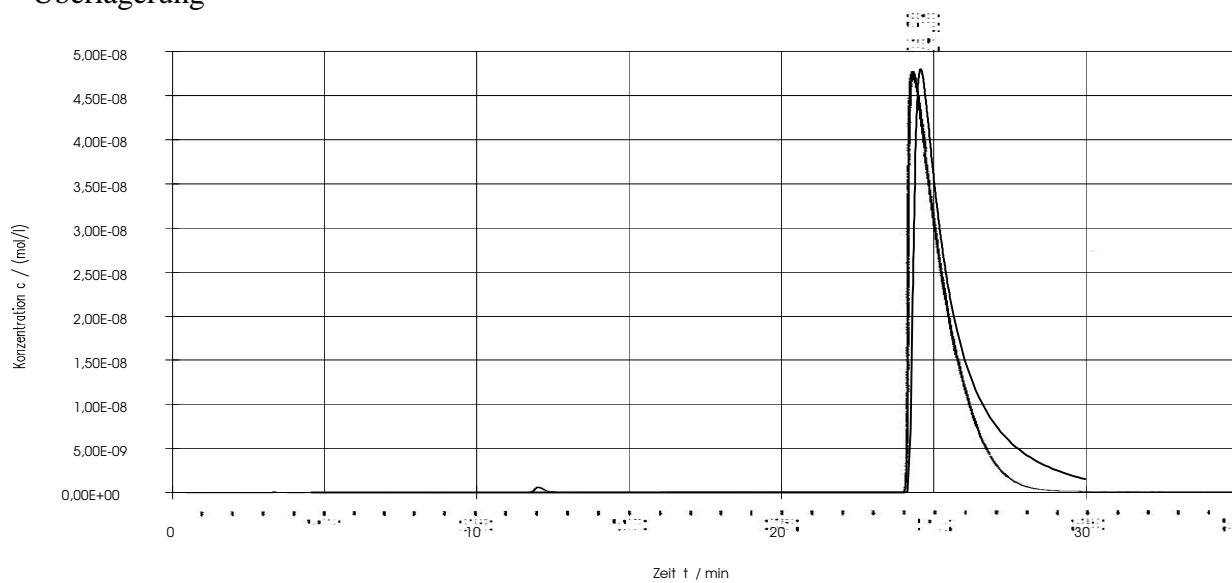
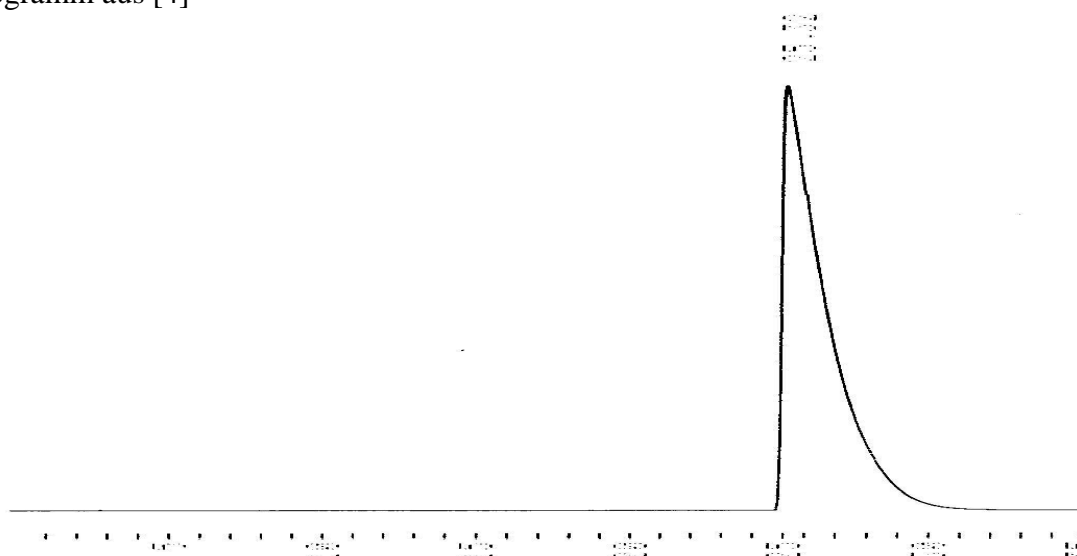
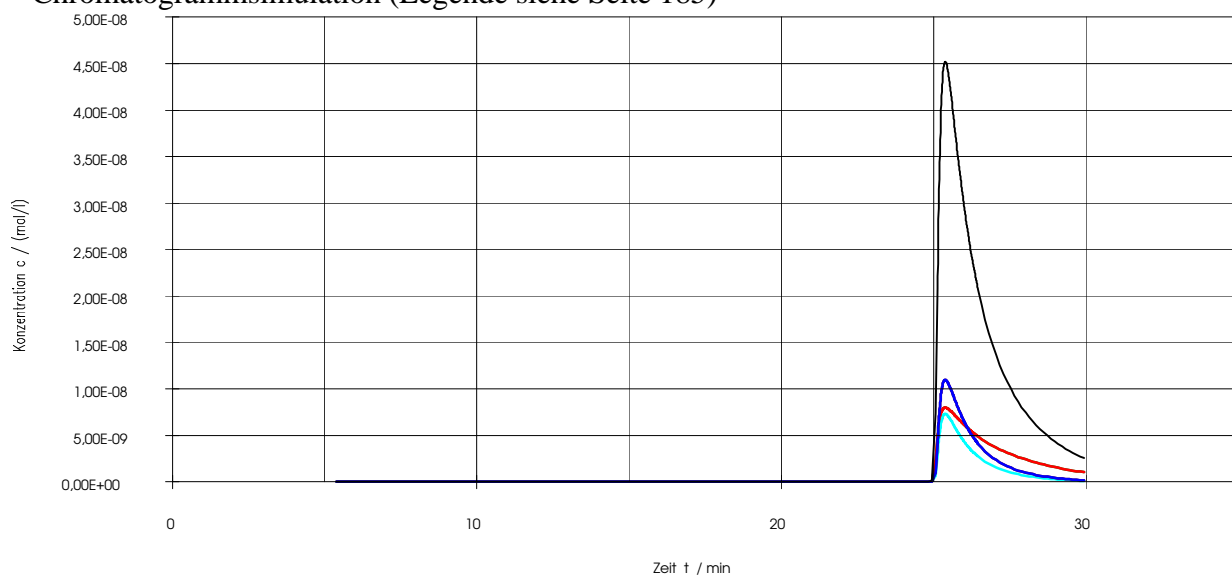


Abb. A83 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

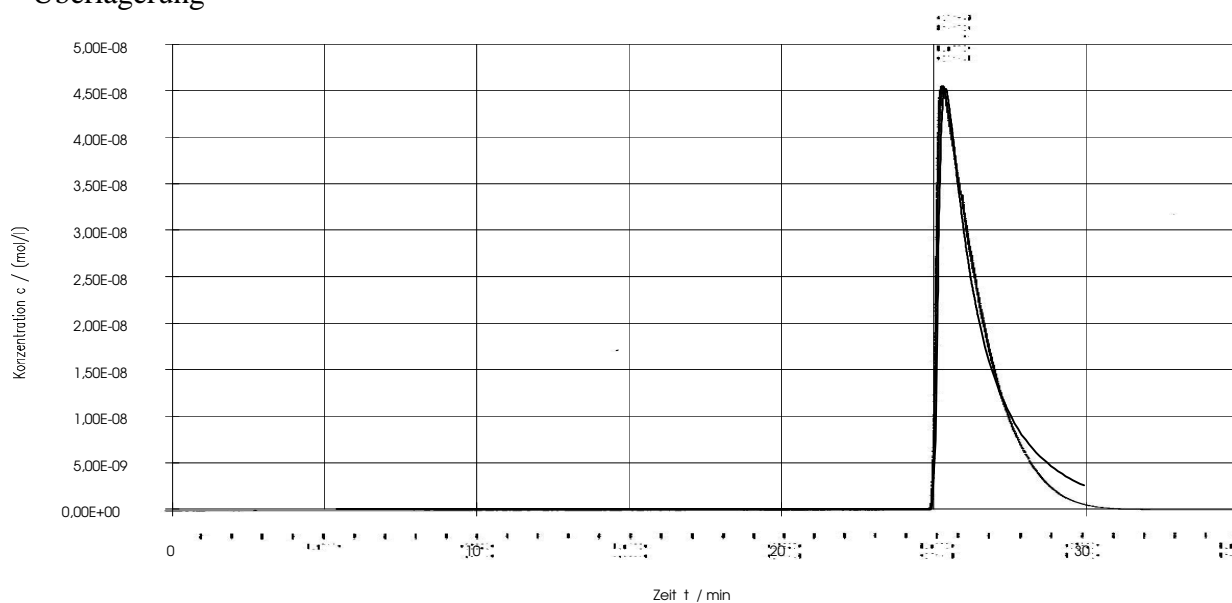
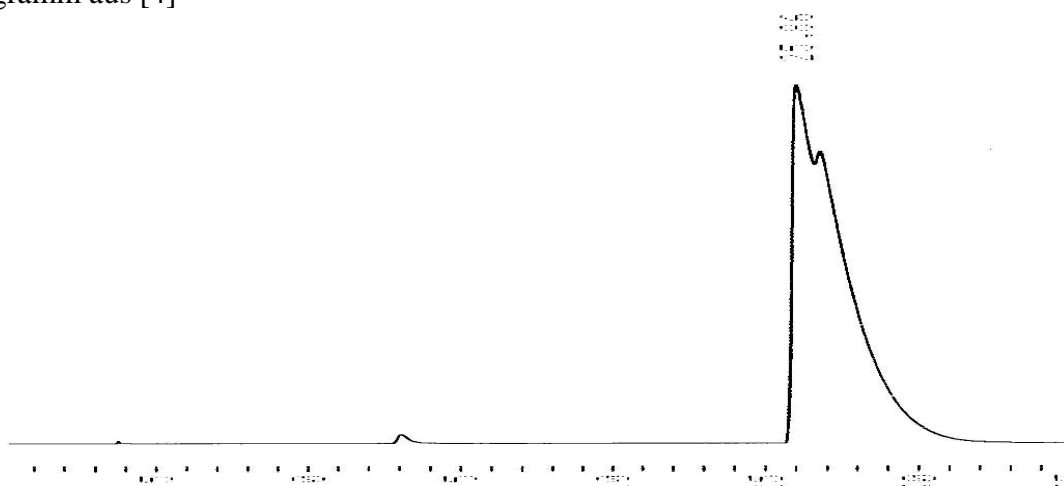
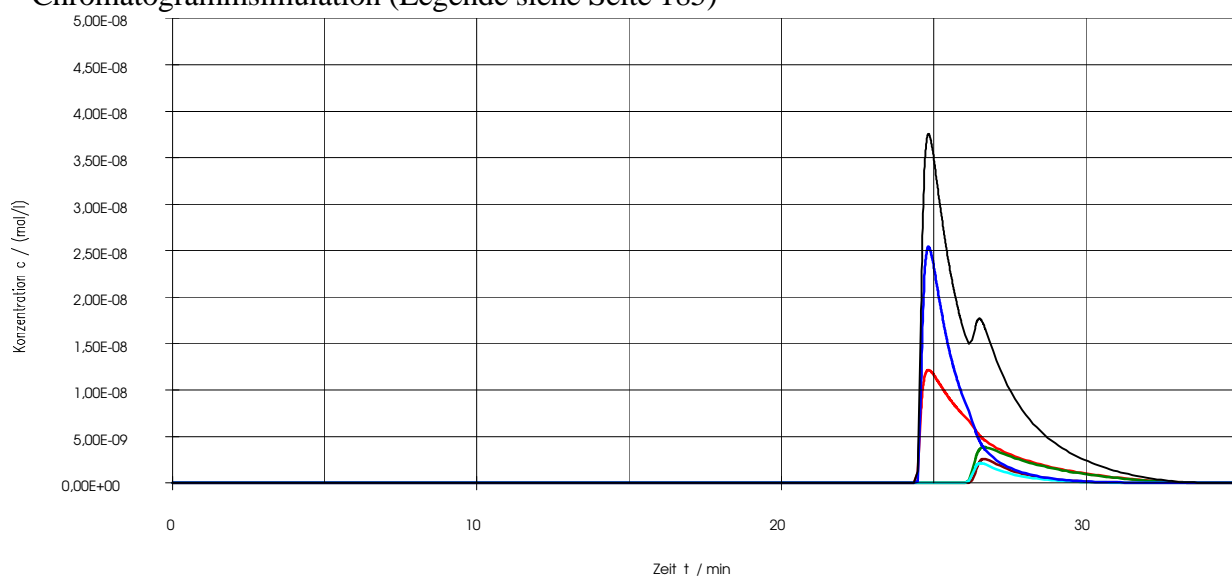


Abb. A84 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

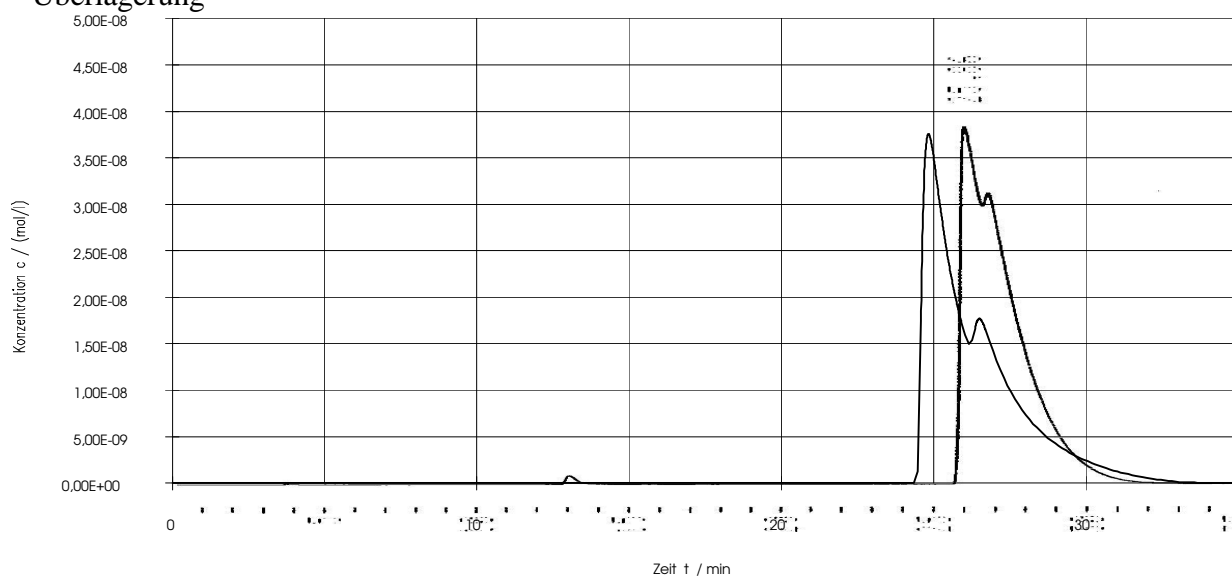
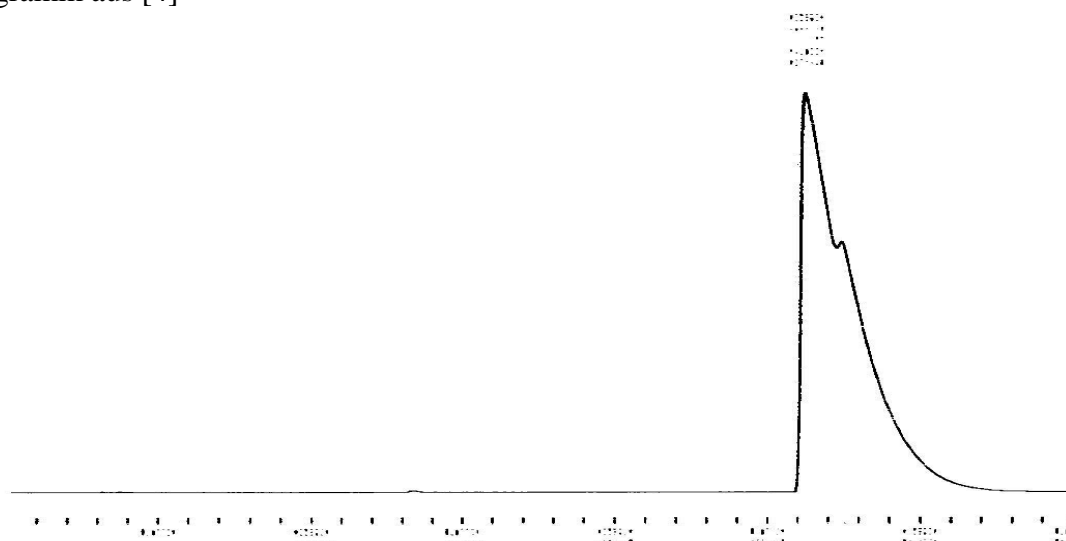
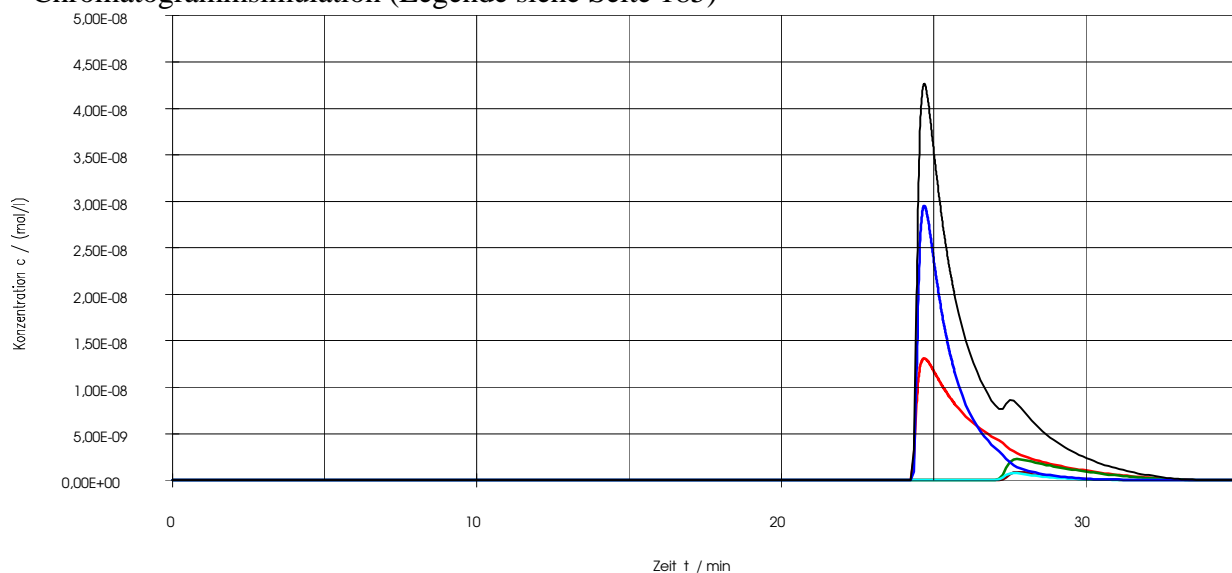


Abb. A85 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 80 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

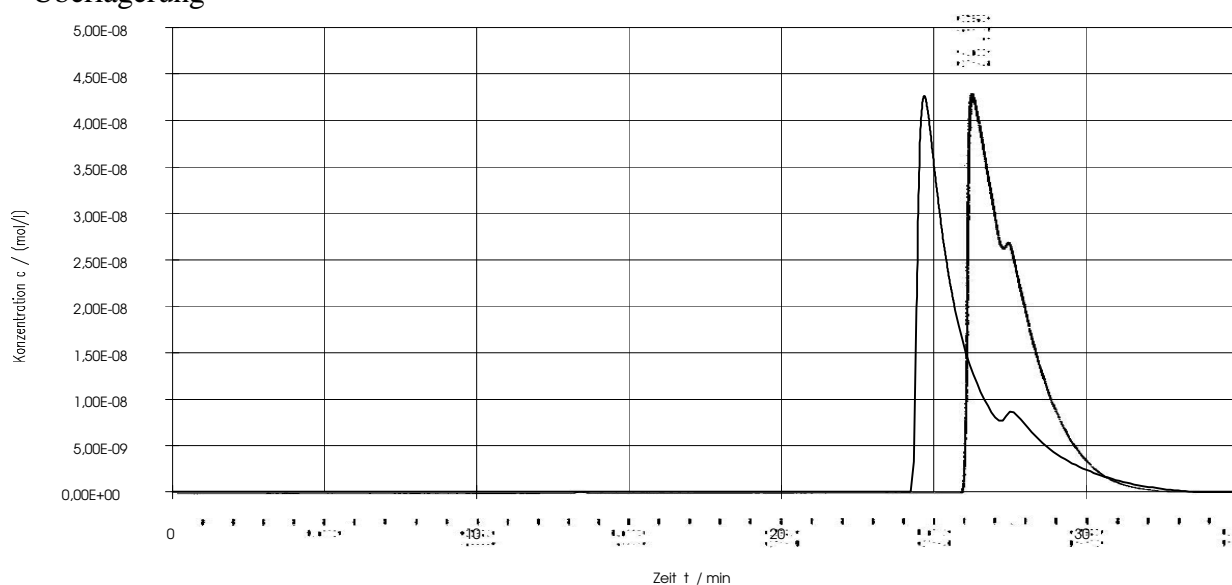
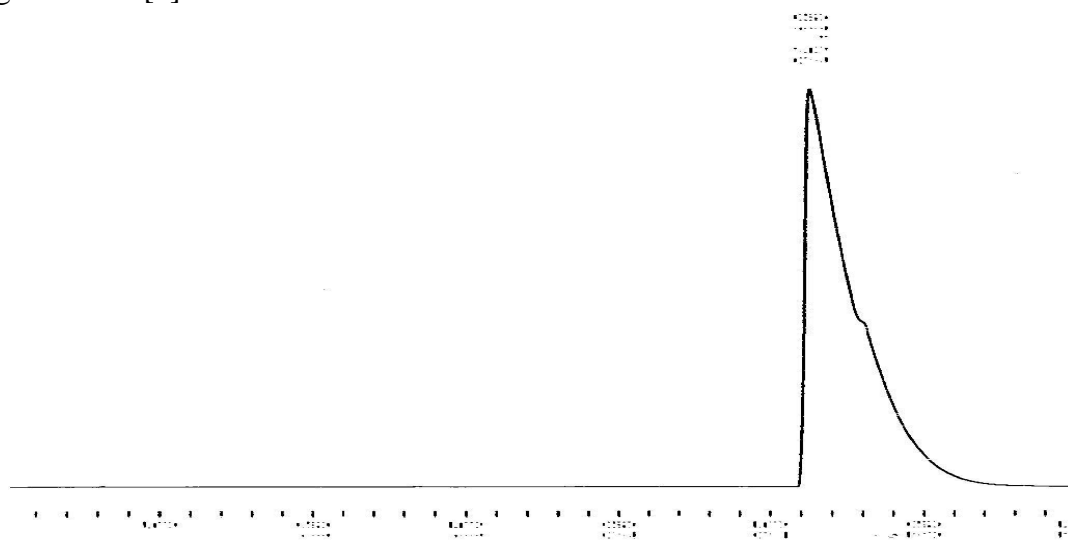
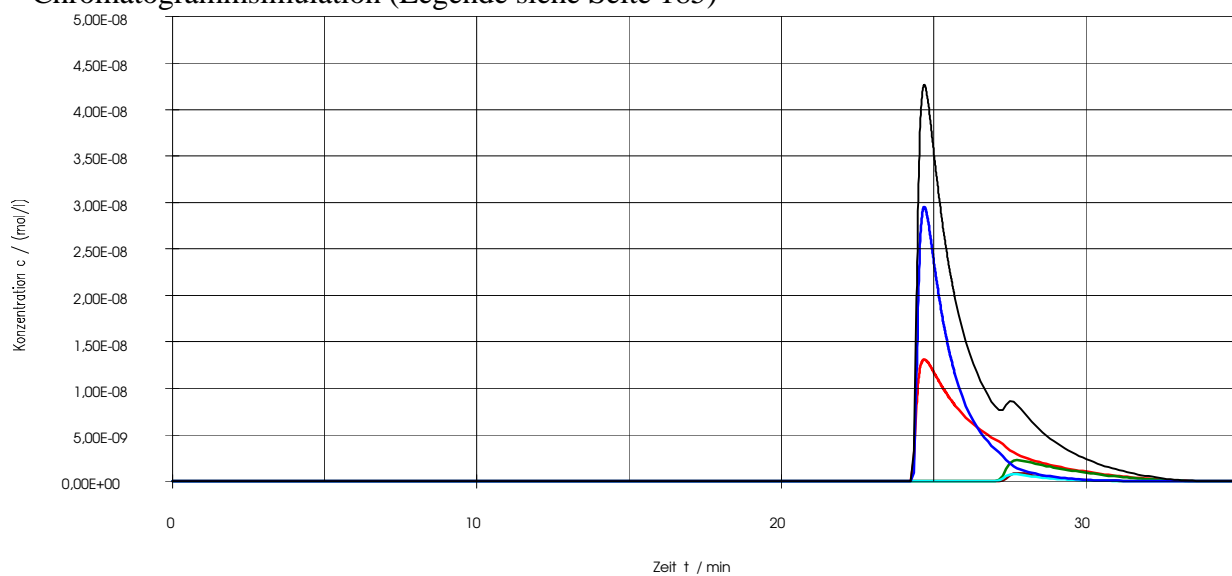


Abb. A86 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester Aufgabe: 20 $\mu$ g, 90 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

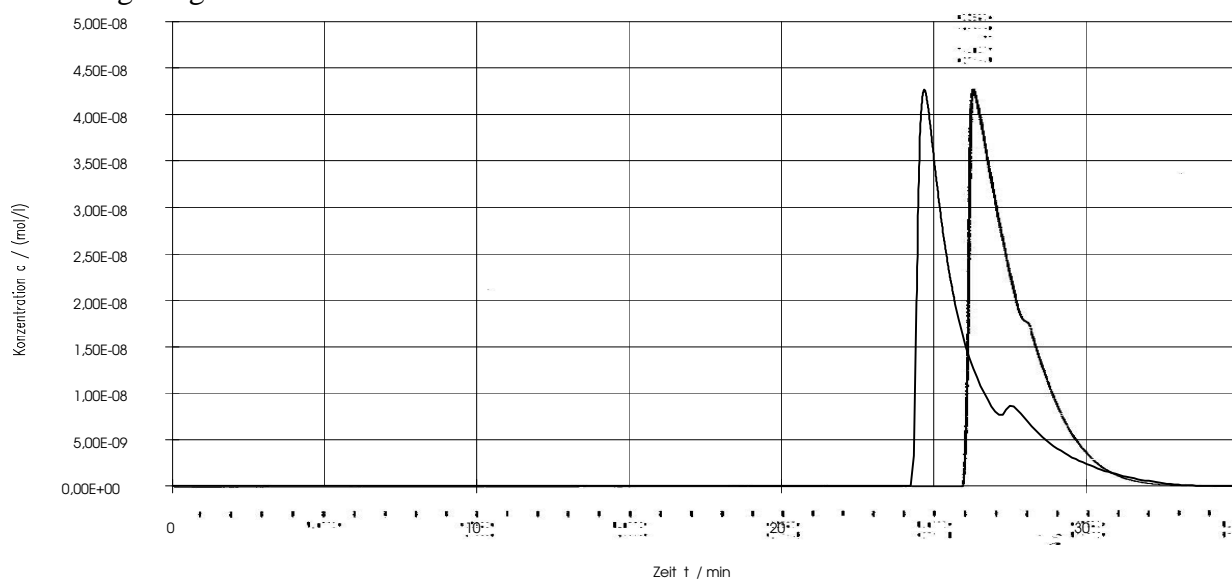
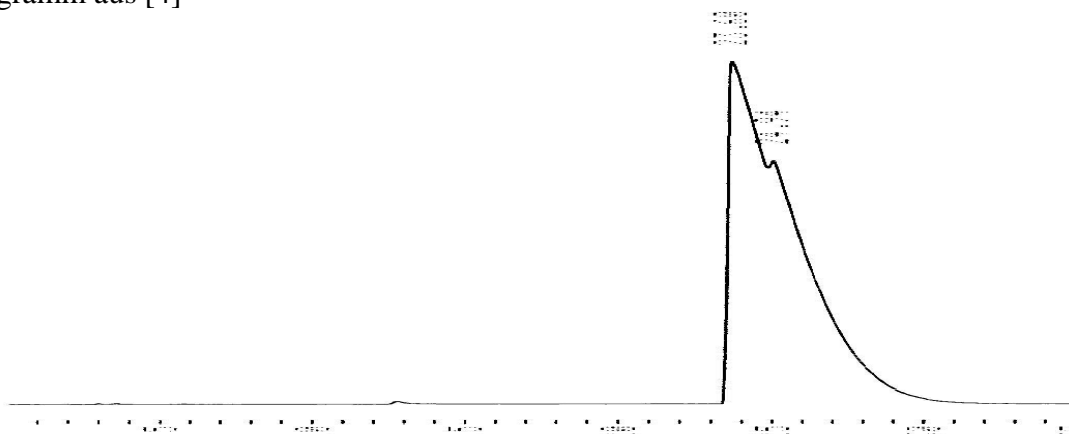
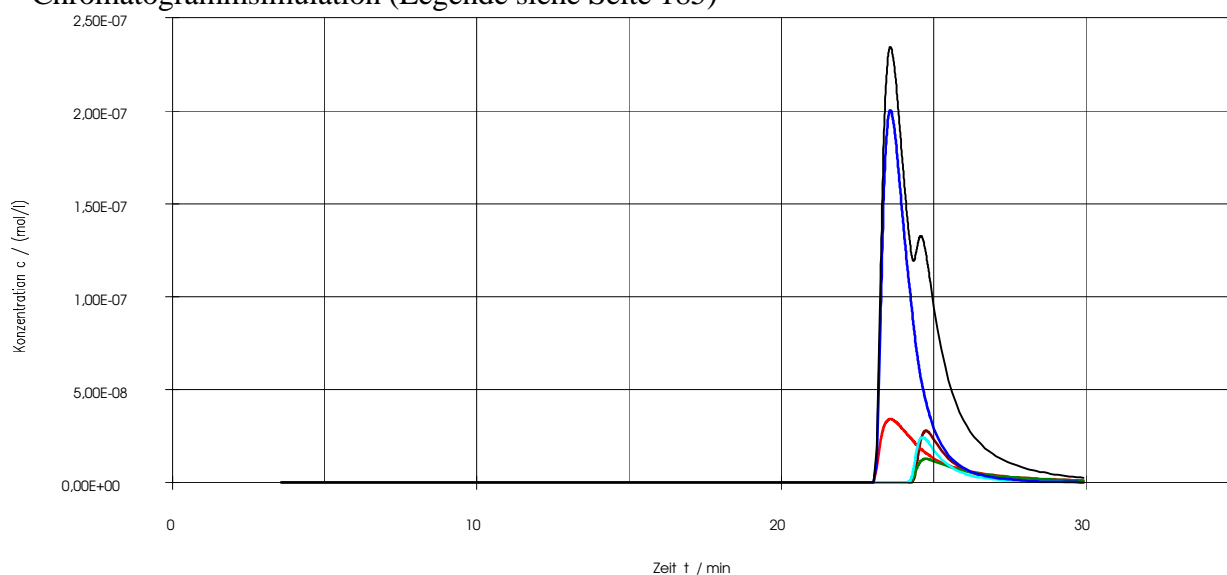




Abb. A87 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester Aufgabe: 100 $\mu$ g, 60 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

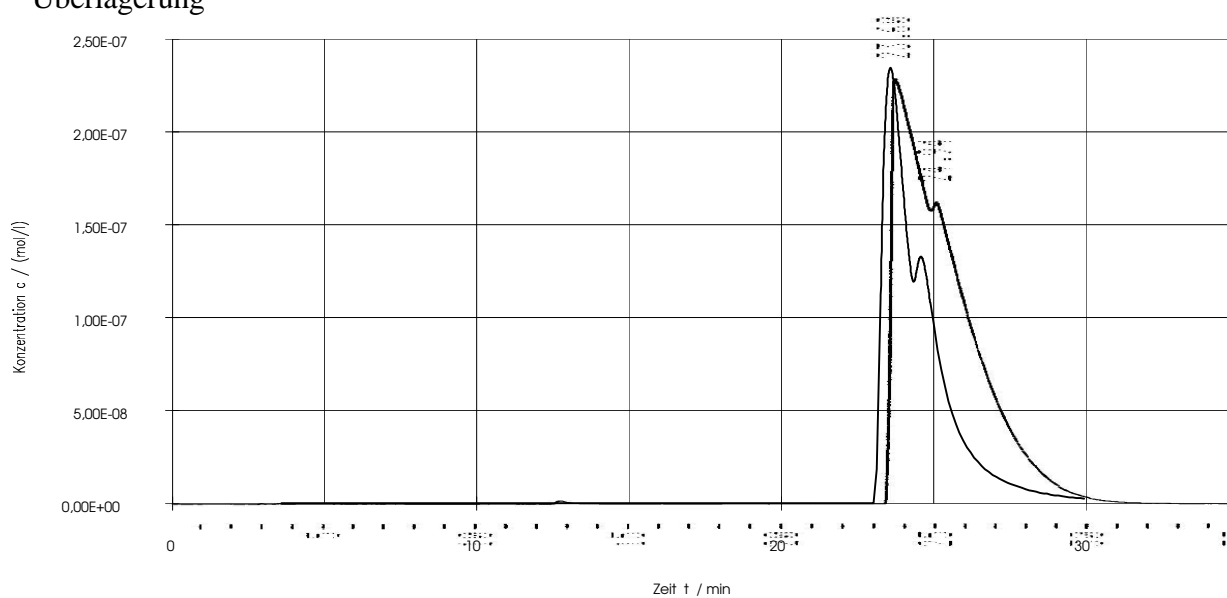
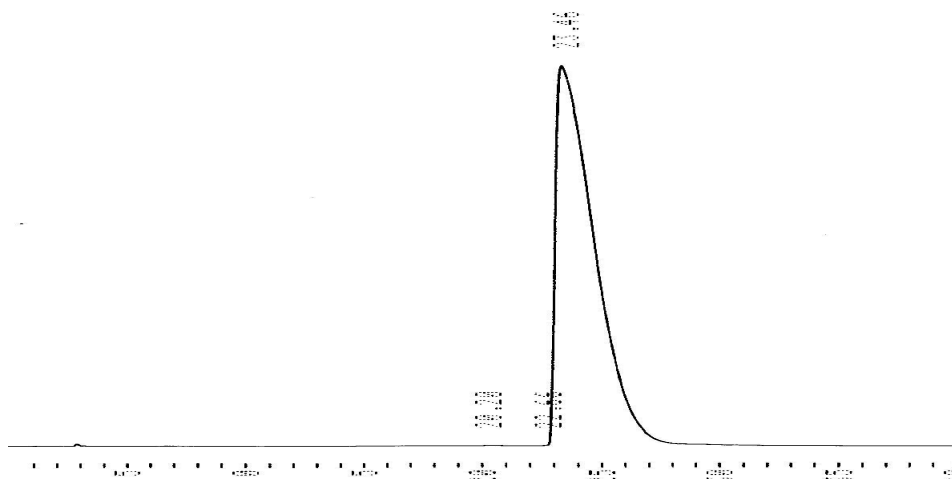
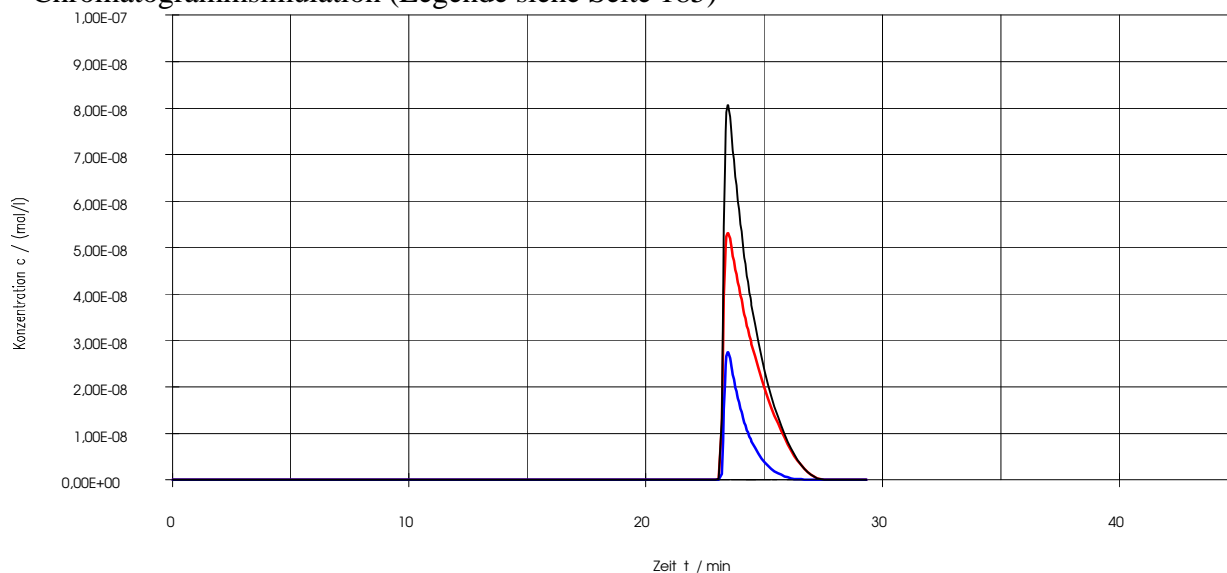


Abb. A88 : Anthryltrifluorethanol Aufgabe: 30 $\mu$ g, 100 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

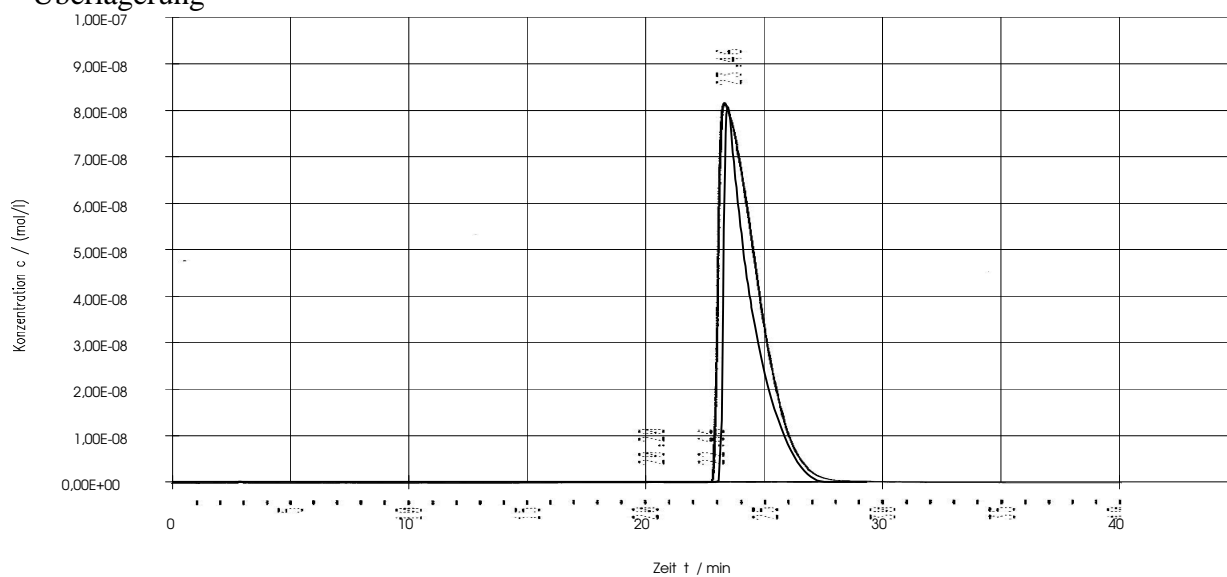
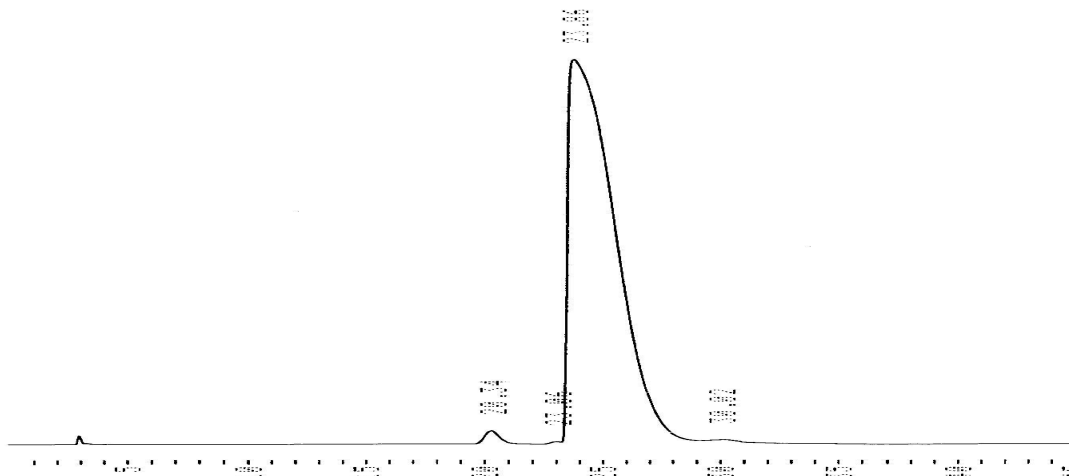
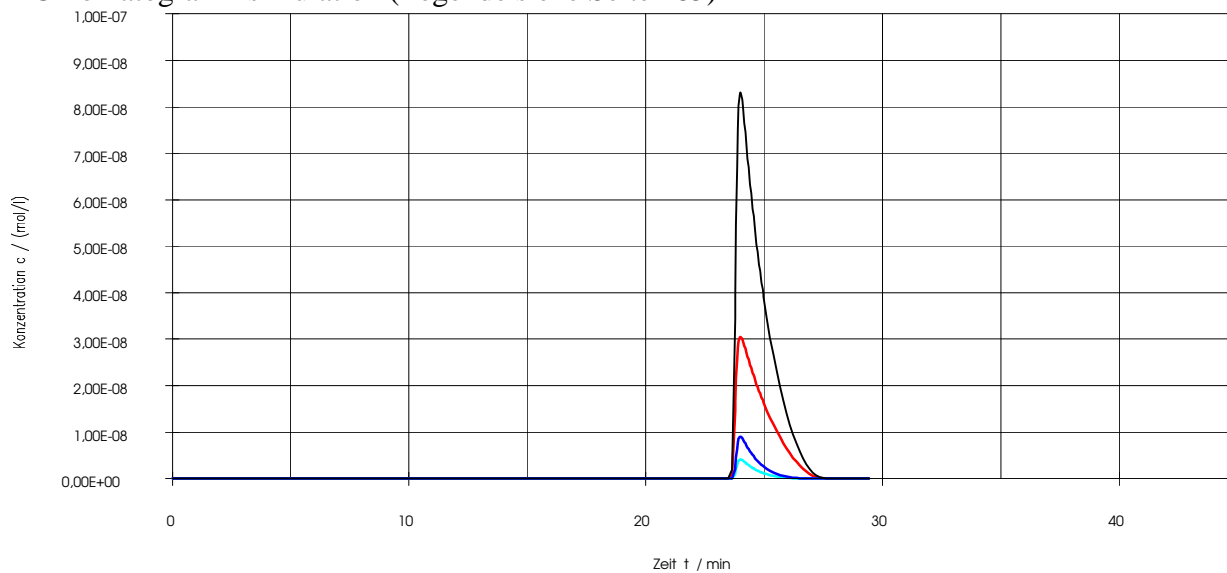


Abb. A89 : Anthryltrifluorethanol Aufgabe: 30 $\mu$ g, 0 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

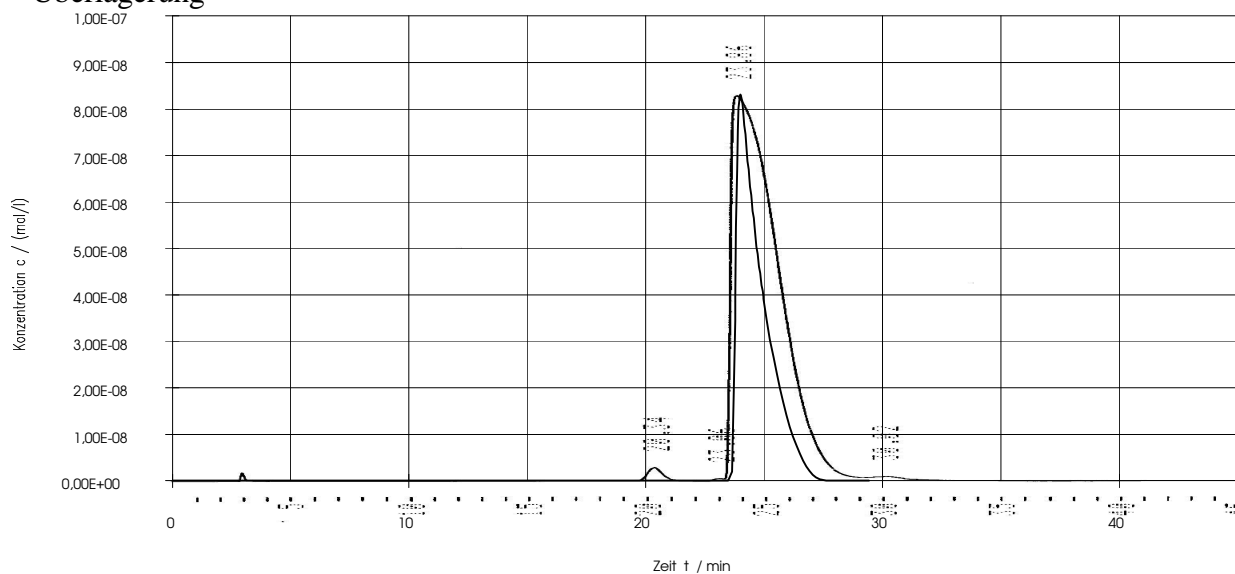
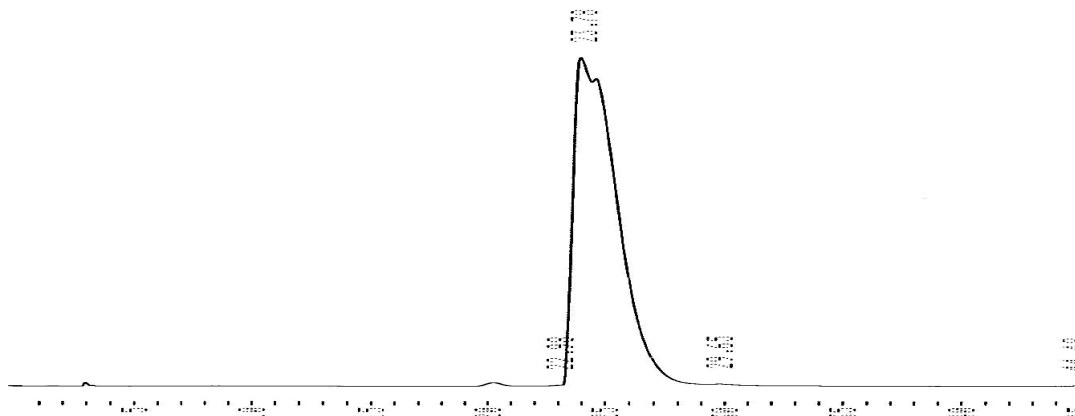
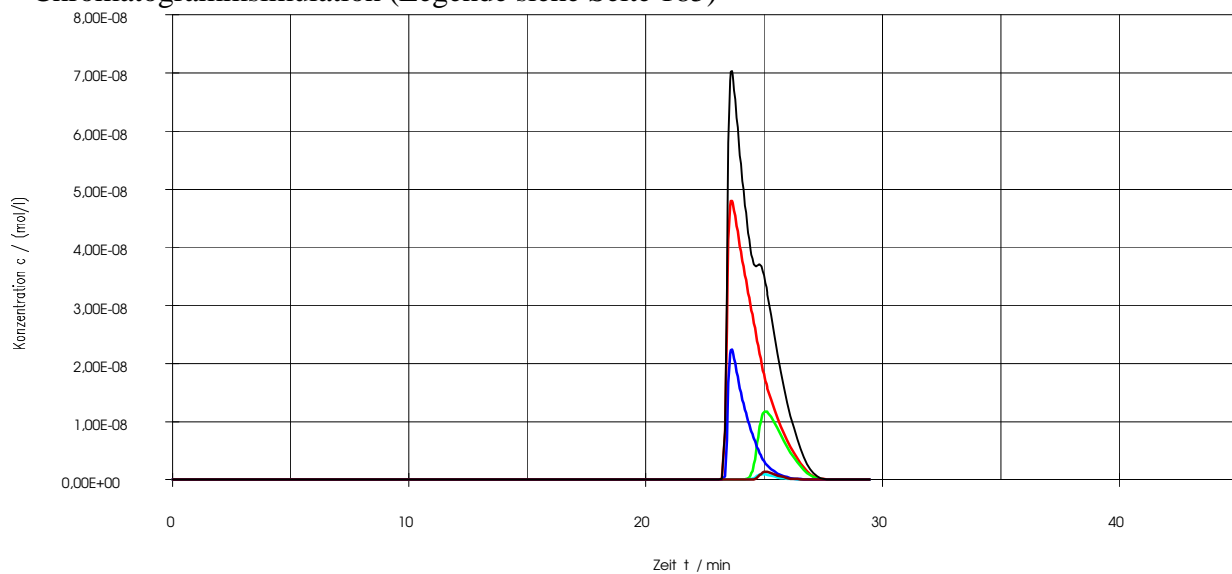


Abb. A90 : Anthryltrifluorethanol Aufgabe: 30µg, 68 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

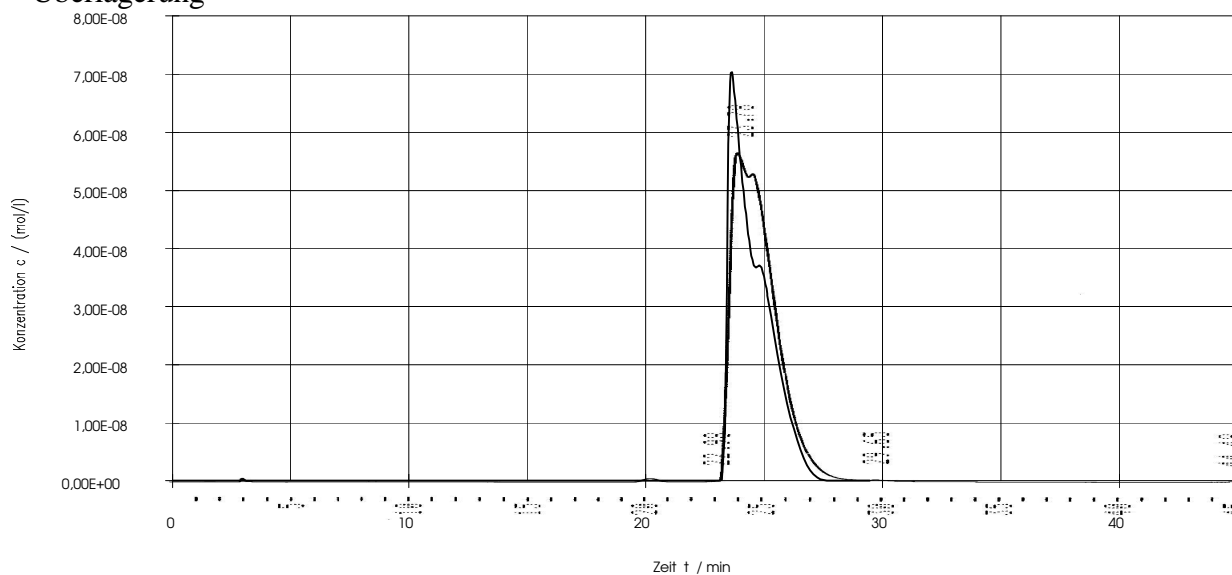
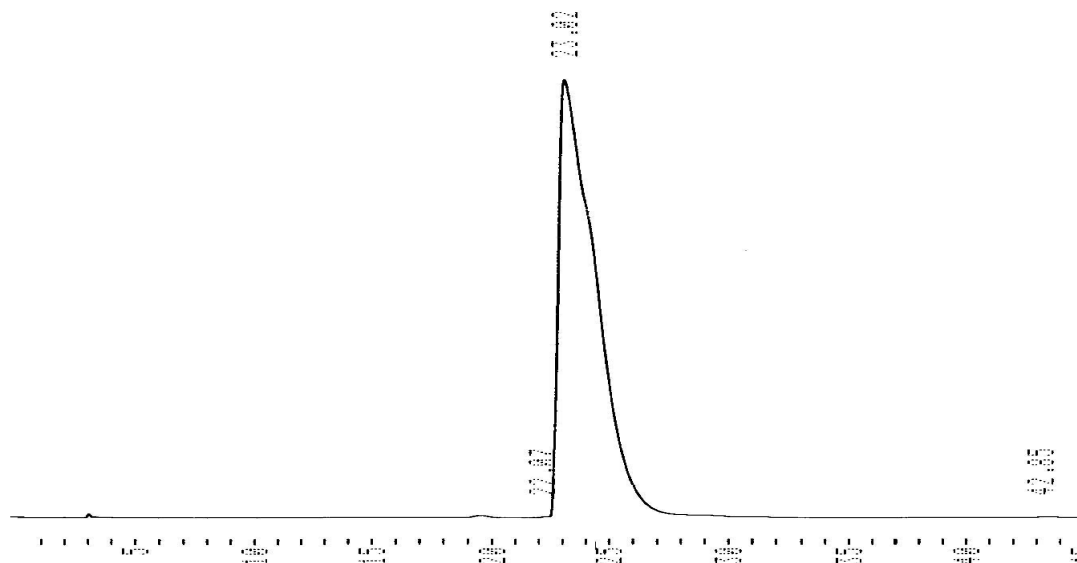
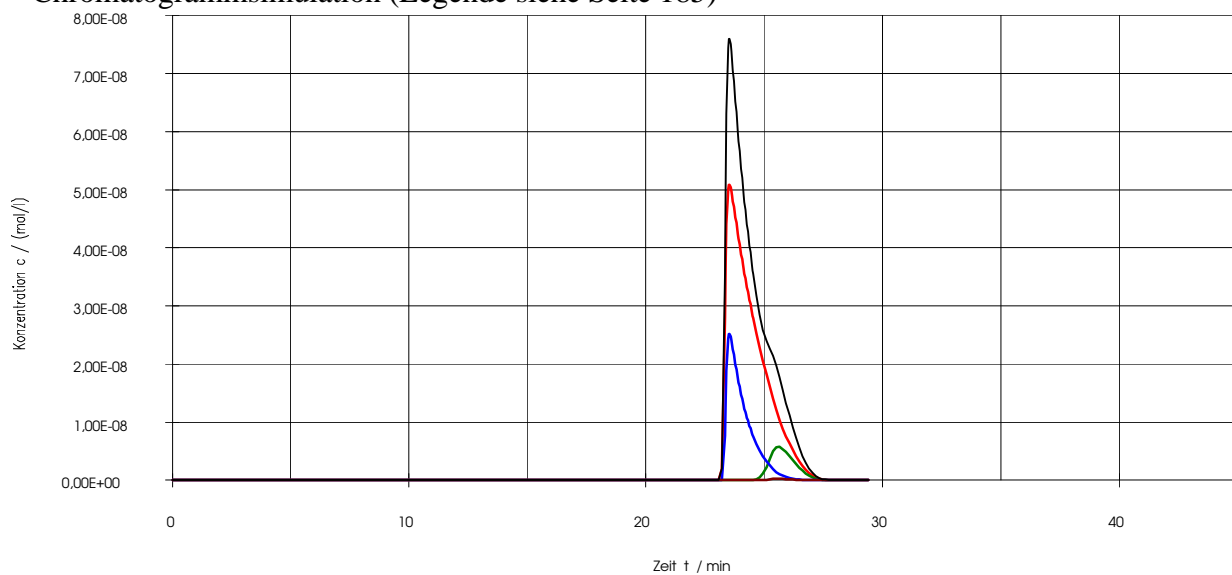


Abb. A91 : Anthryltrifluorethanol Aufgabe: 30 $\mu$ g, 86 ee%, experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

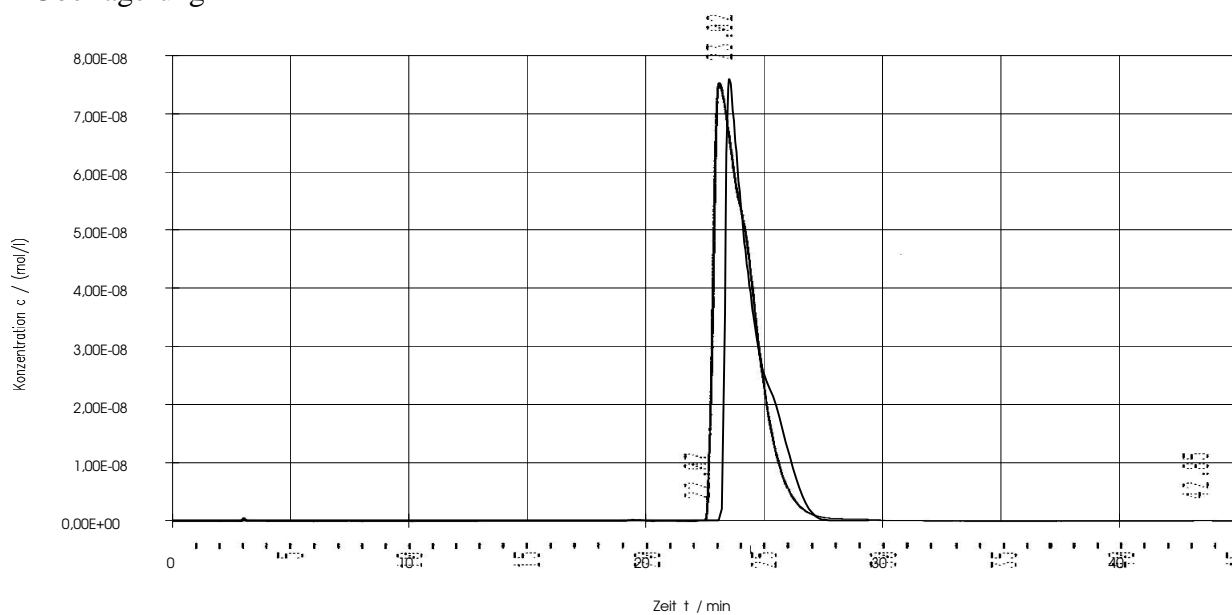
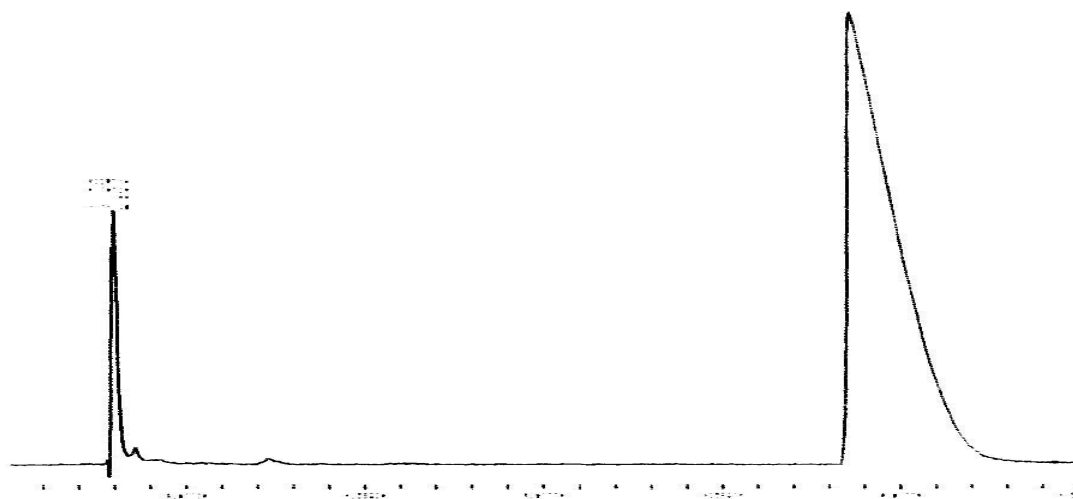
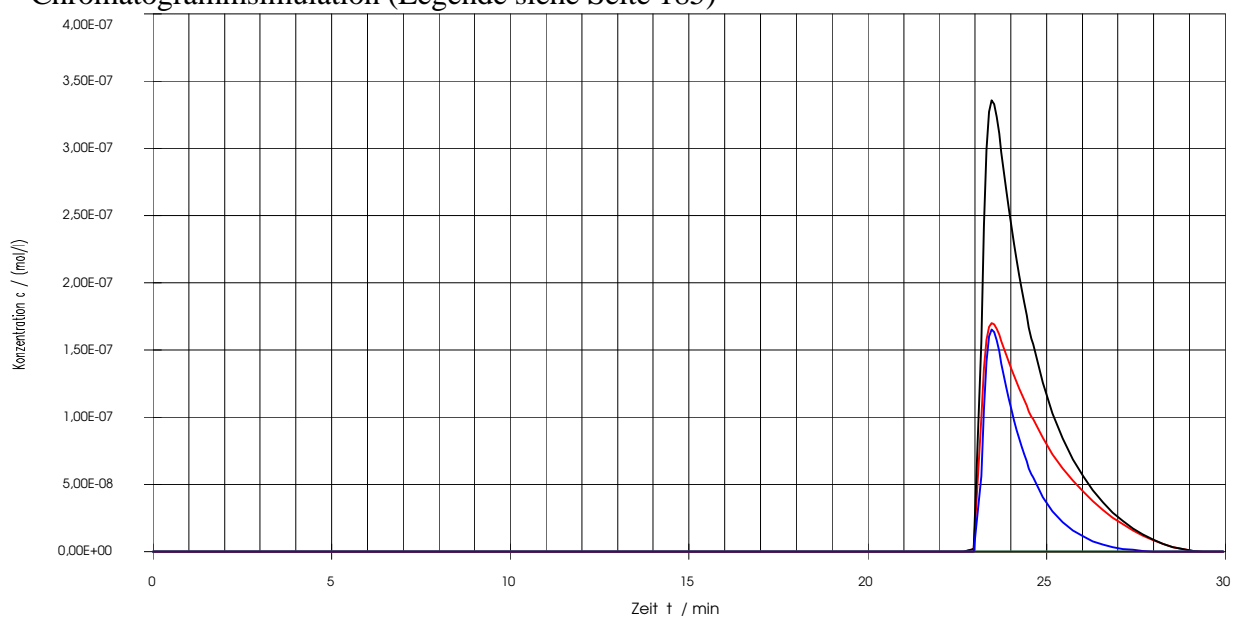


Abb. A92 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 100  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

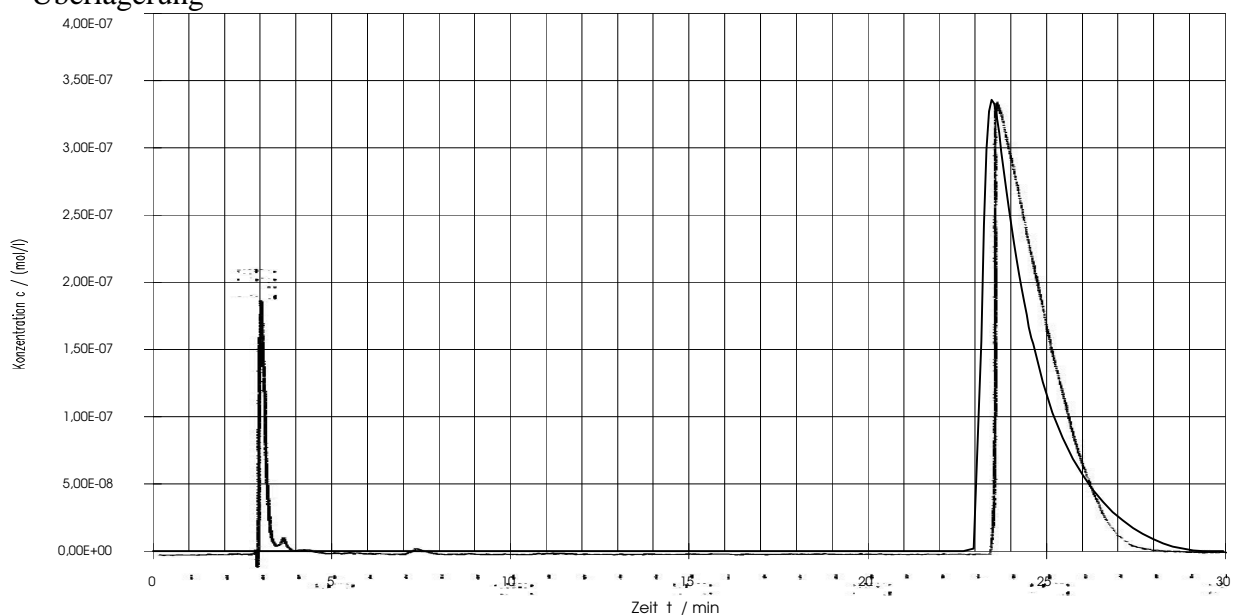
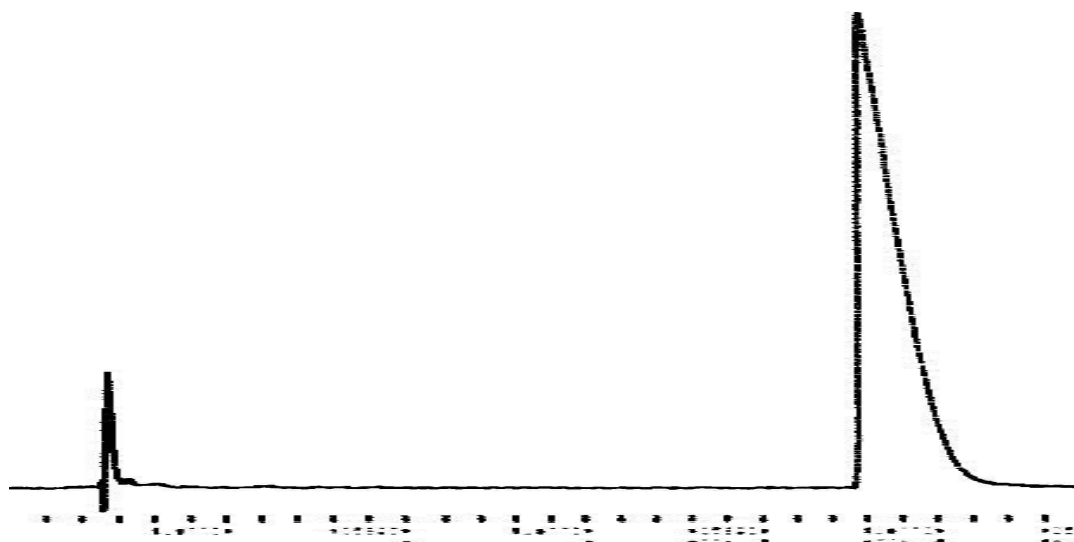
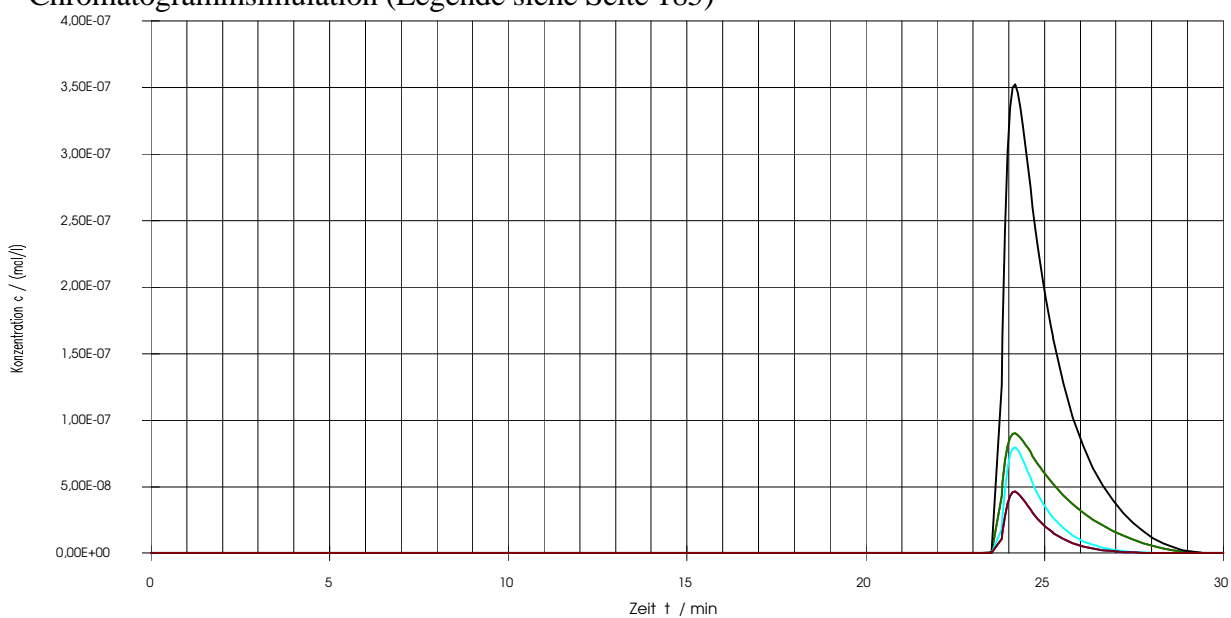


Abb. A93 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 100  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

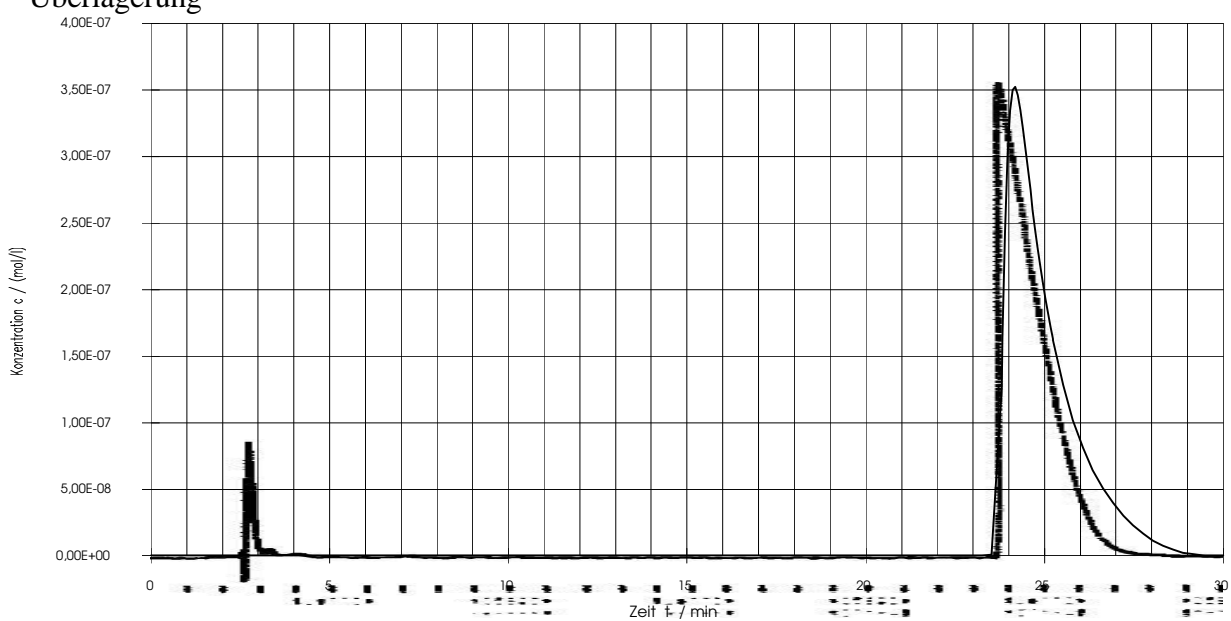
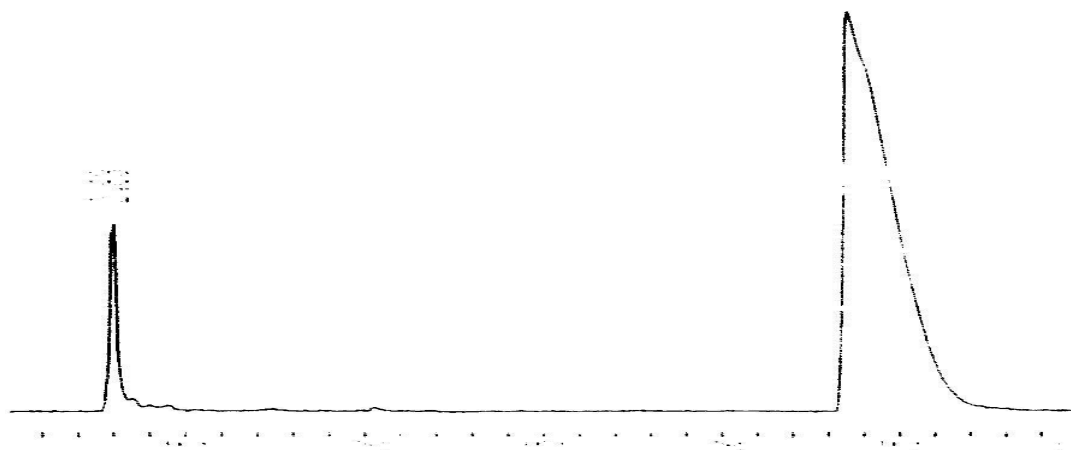
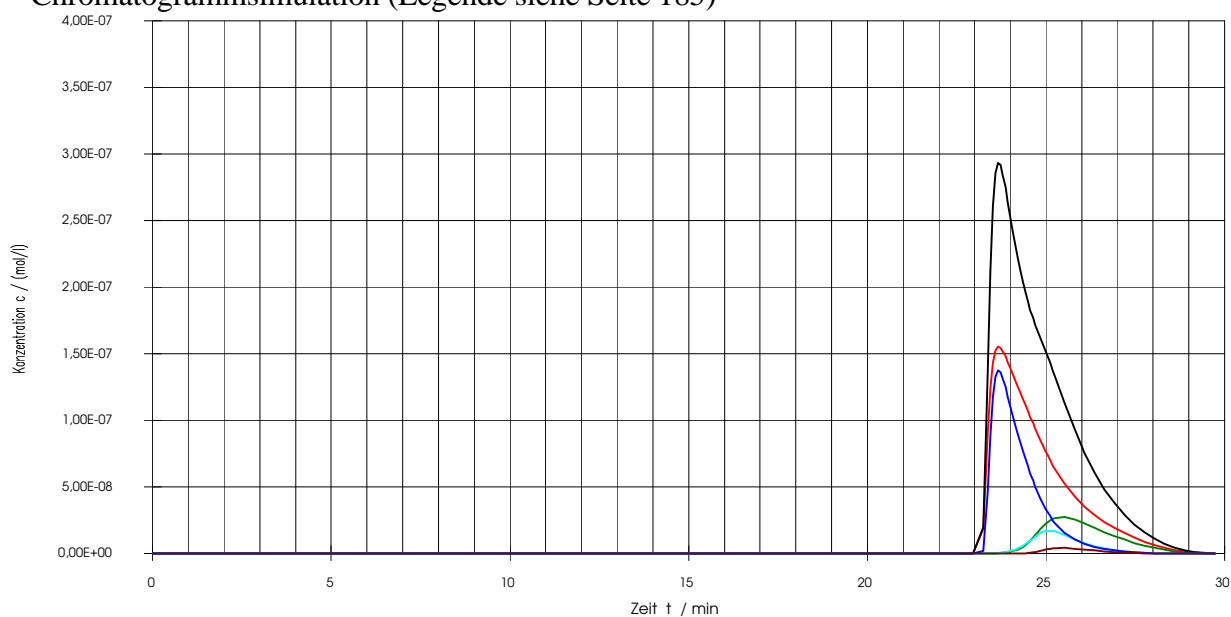


Abb. A94 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 100  $\mu\text{g}$ , 70 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

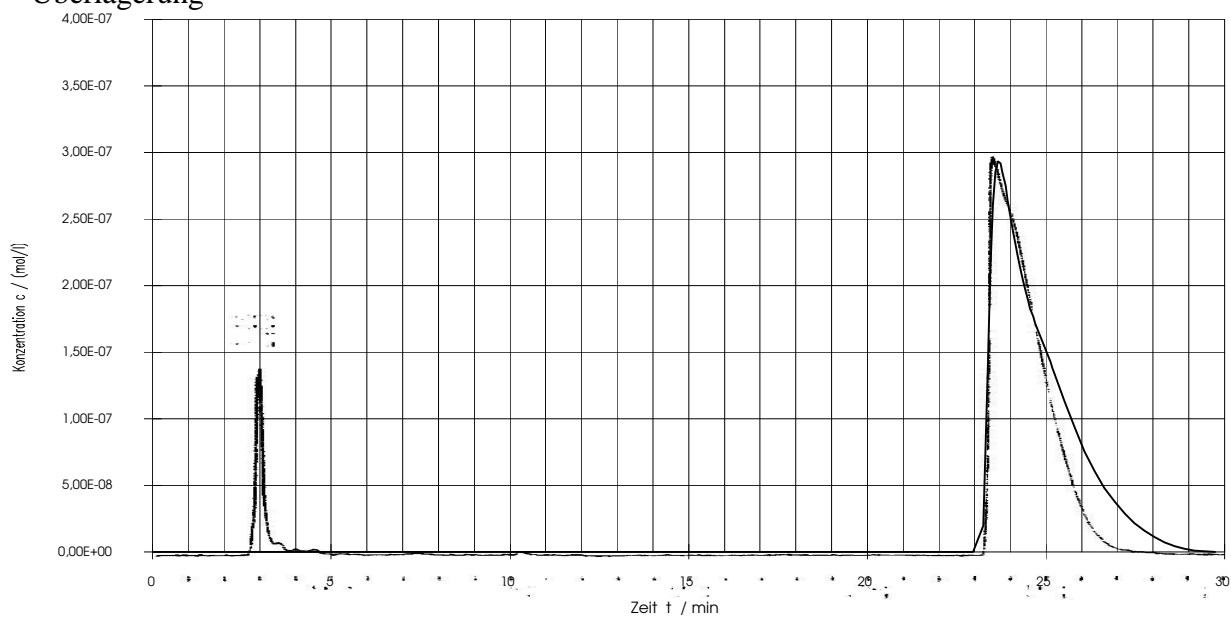
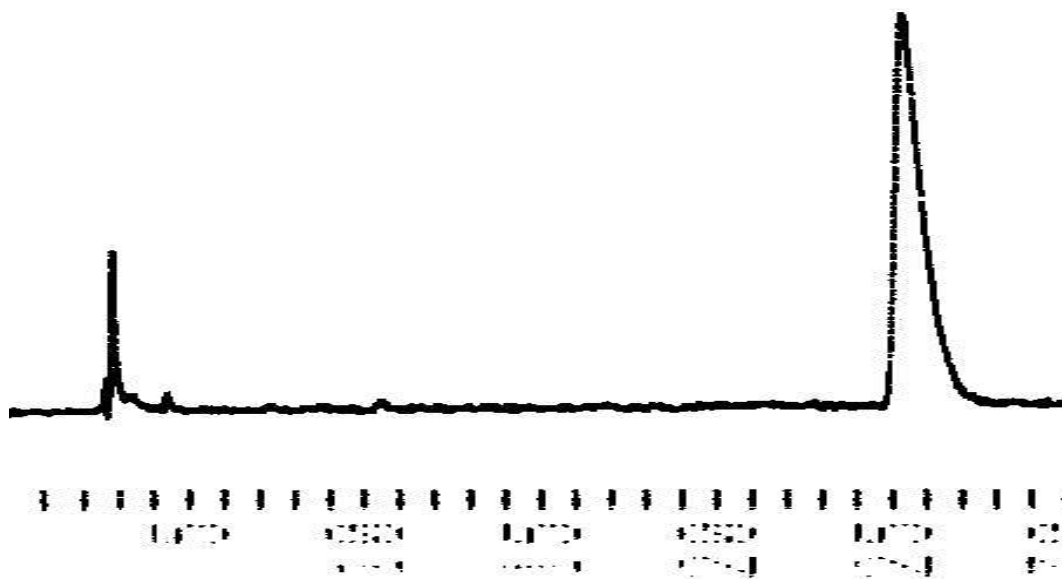
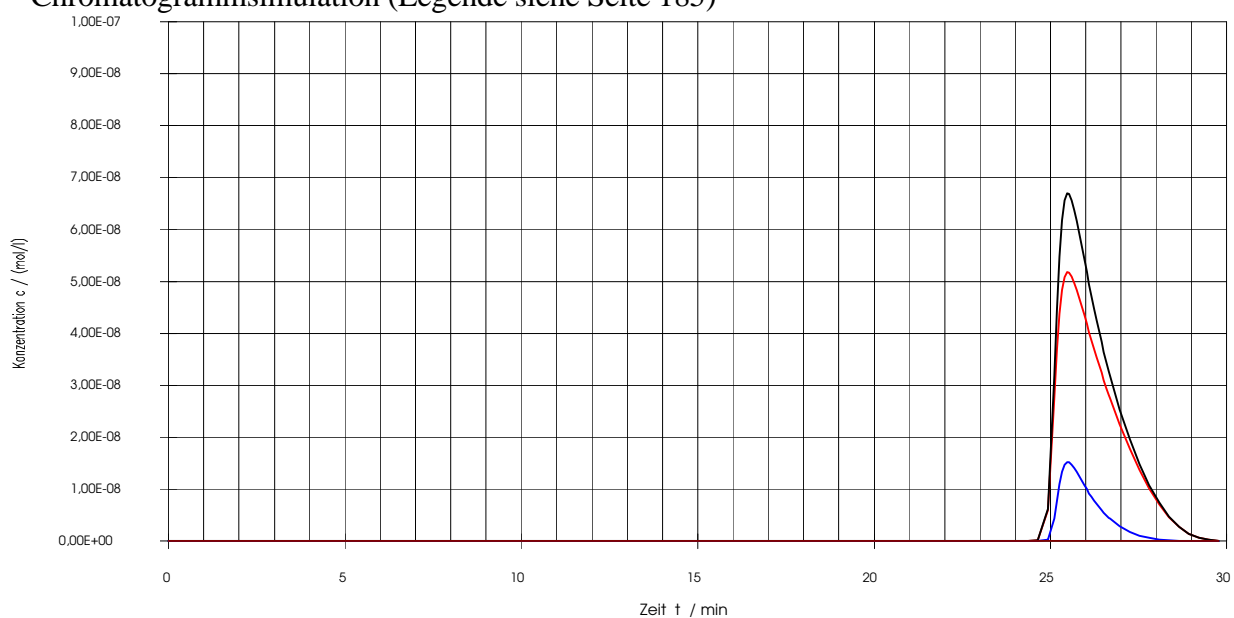




Abb. A95 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 100 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

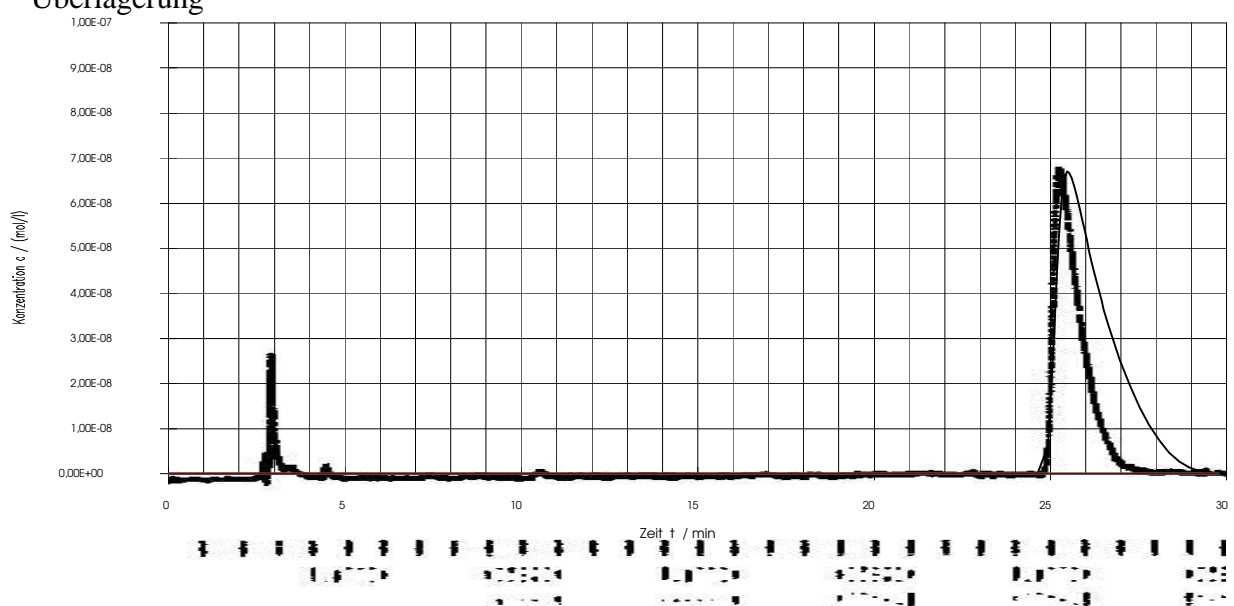
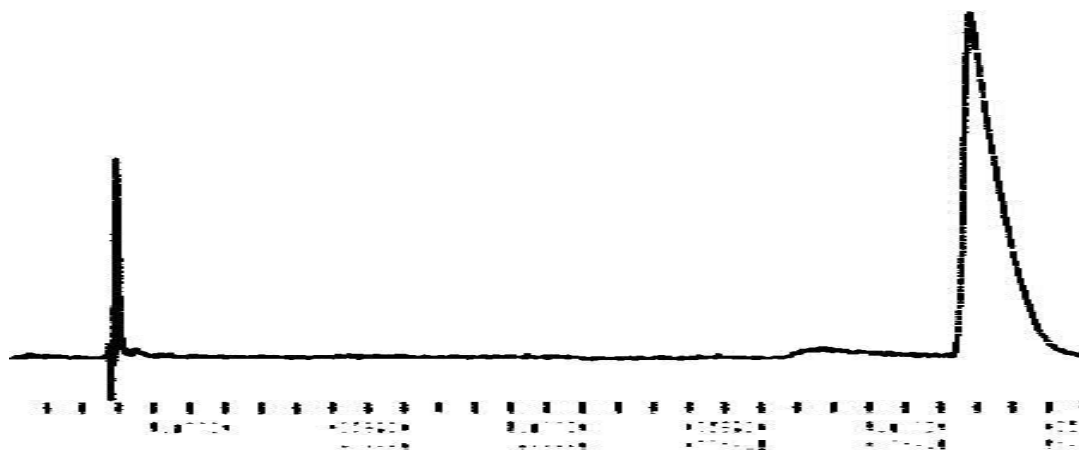
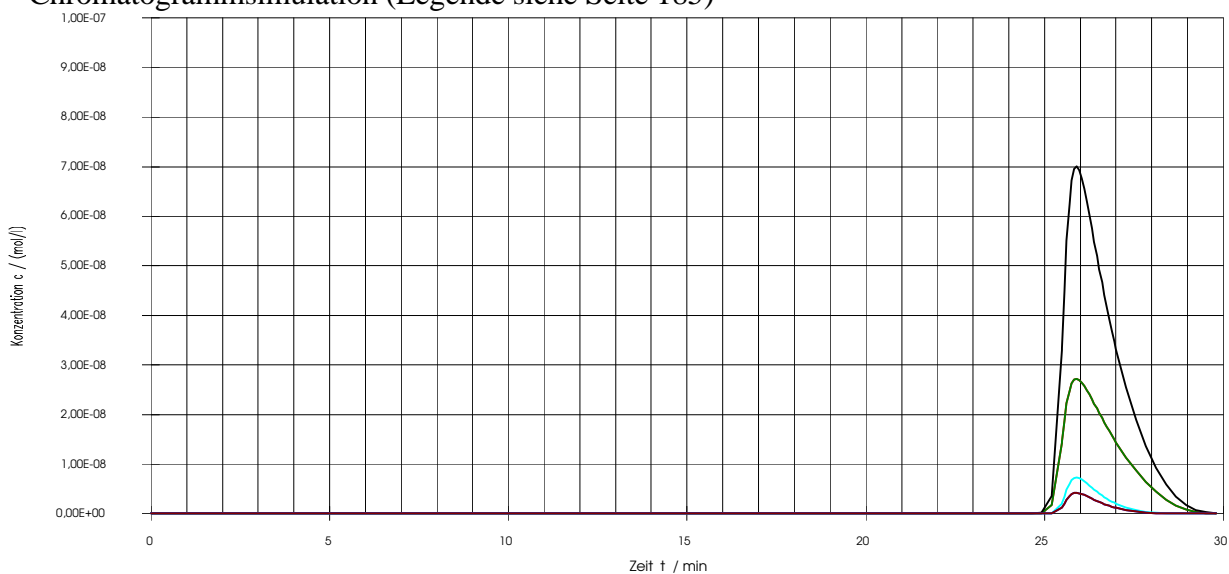


Abb. A96 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

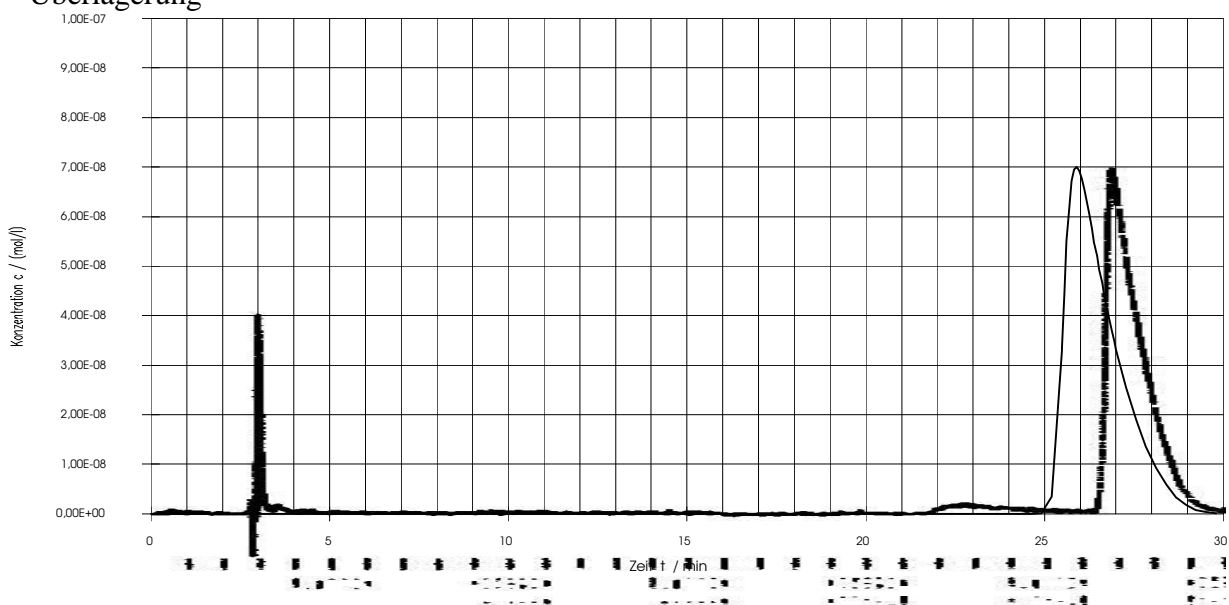
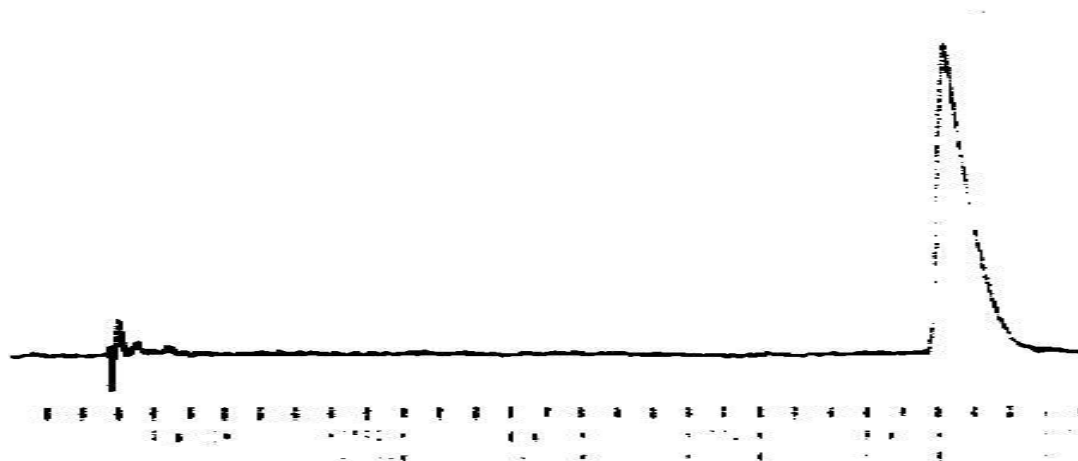
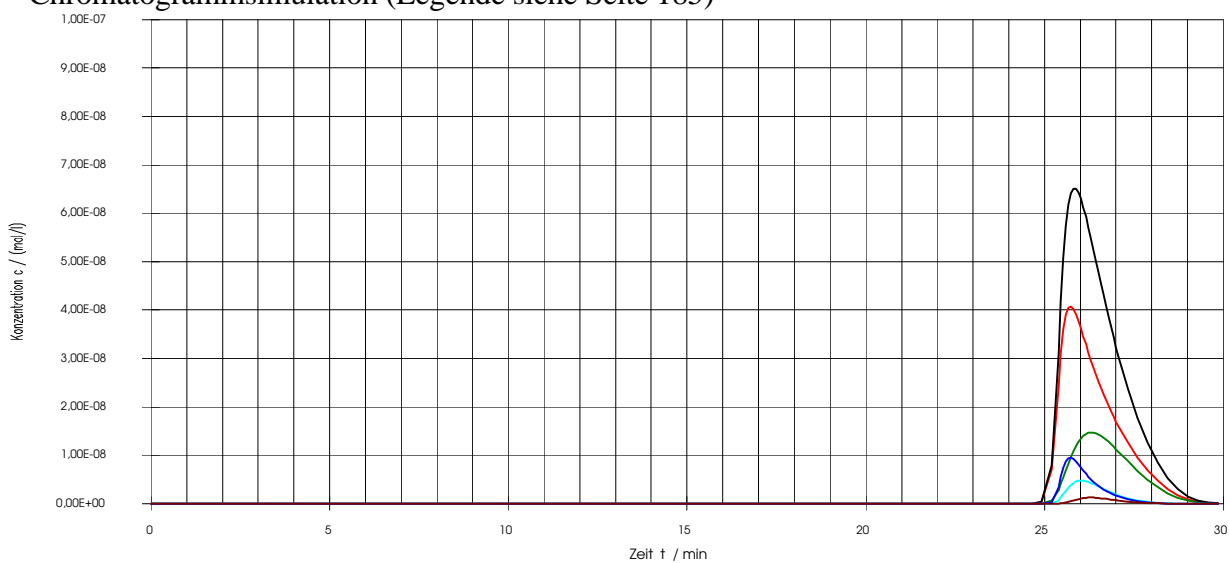


Abb. A97 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 40 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

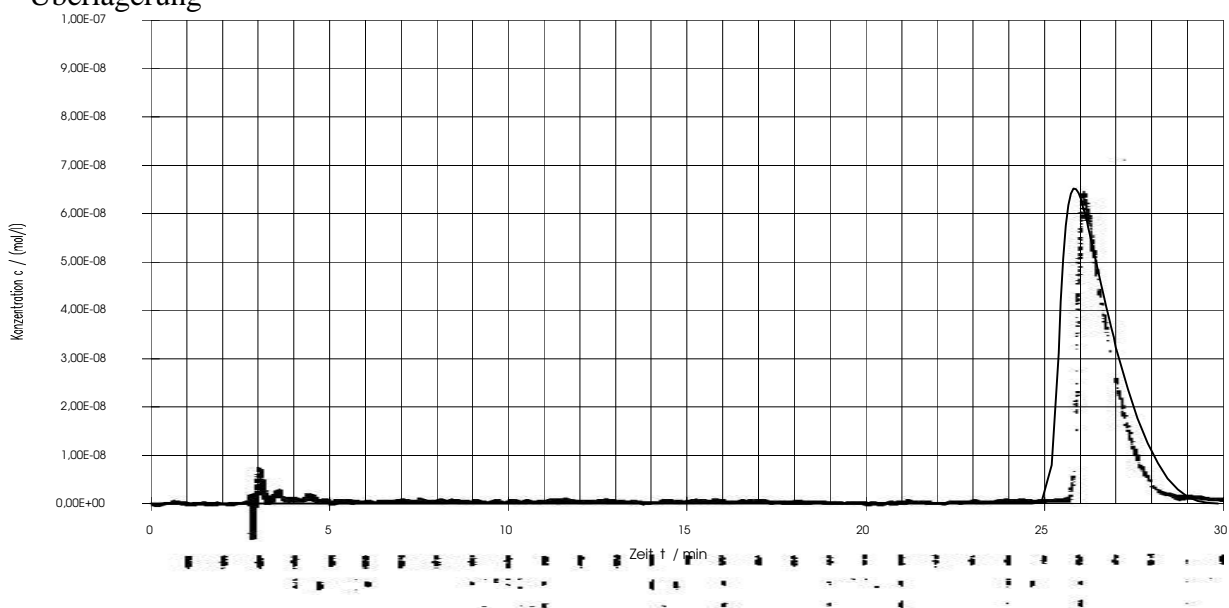
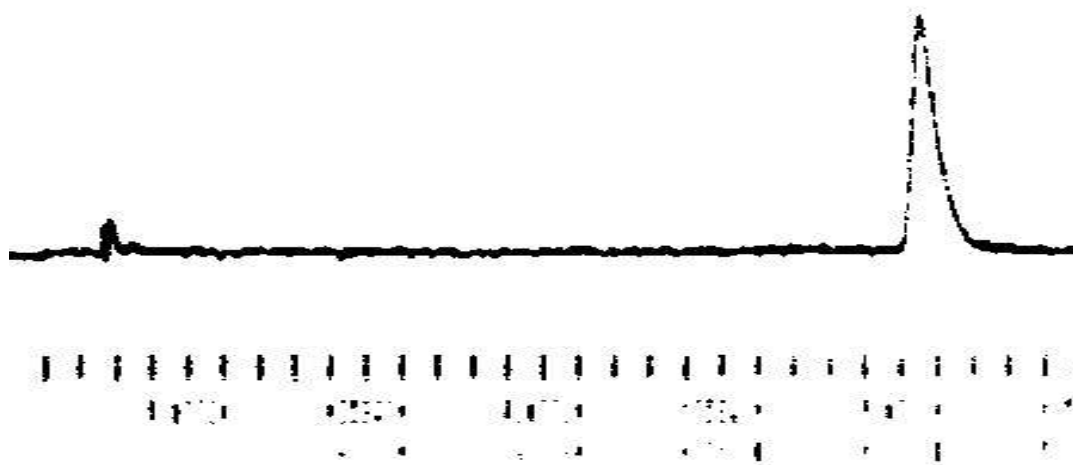
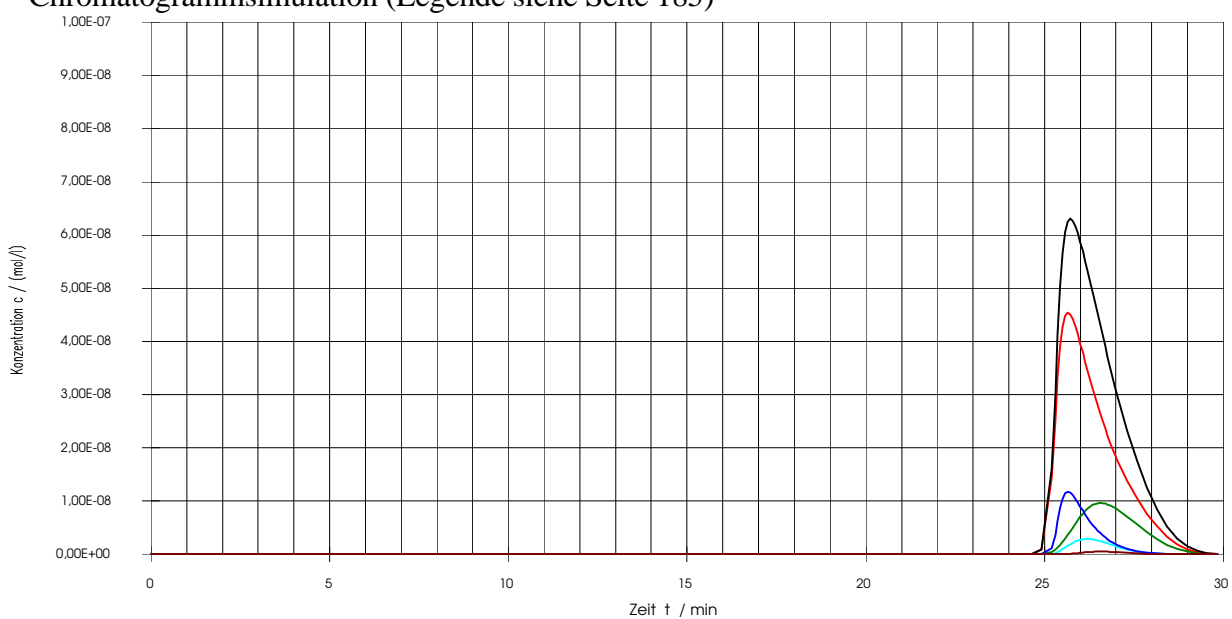


Abb. A98 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 60 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

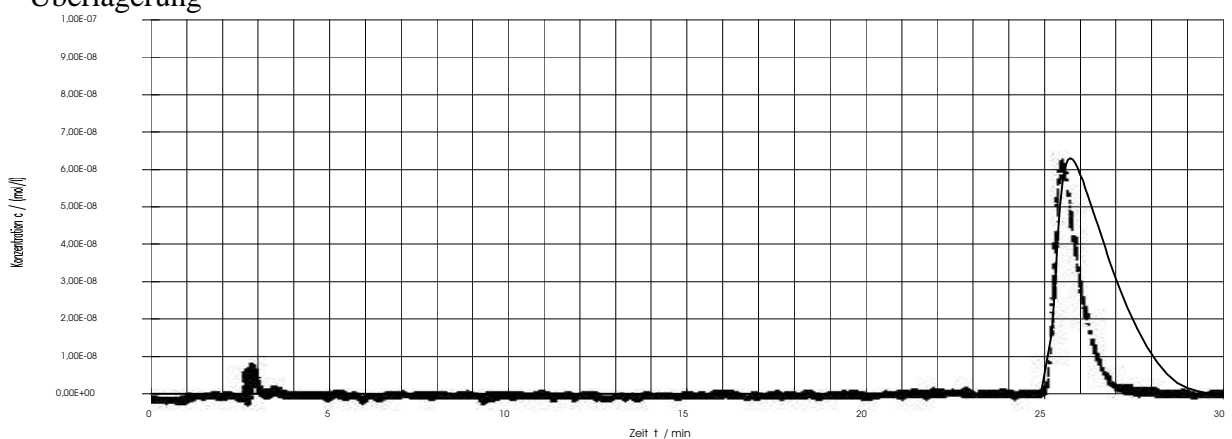
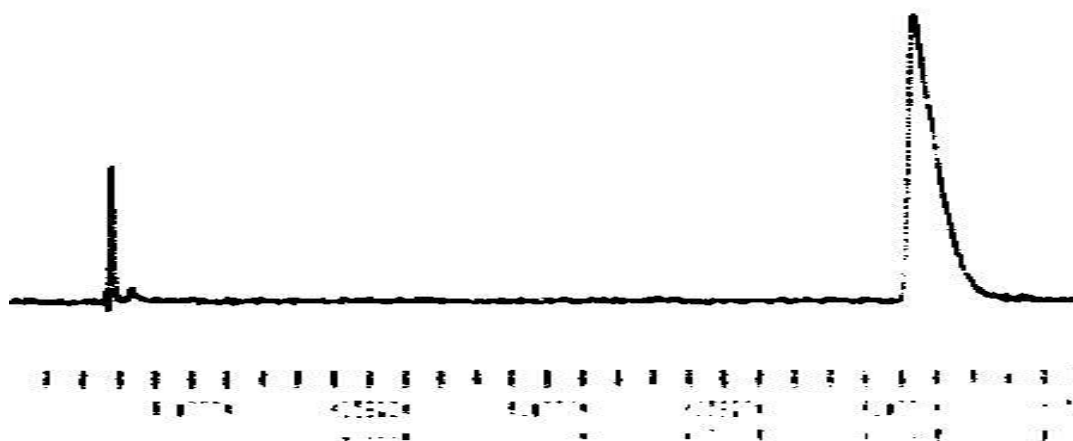
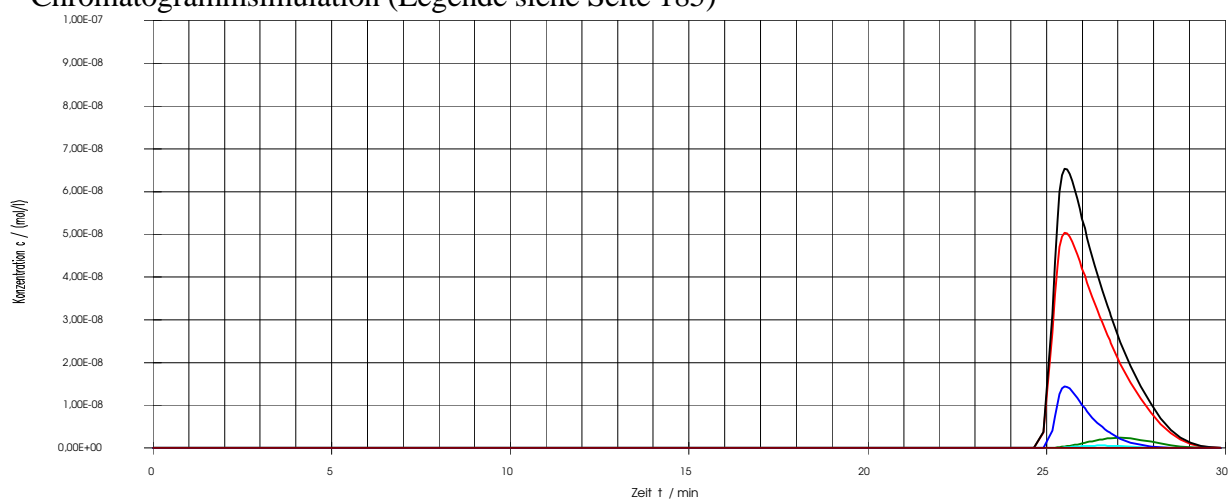


Abb. A99 : Phenyltrifluorethanol Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 90 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

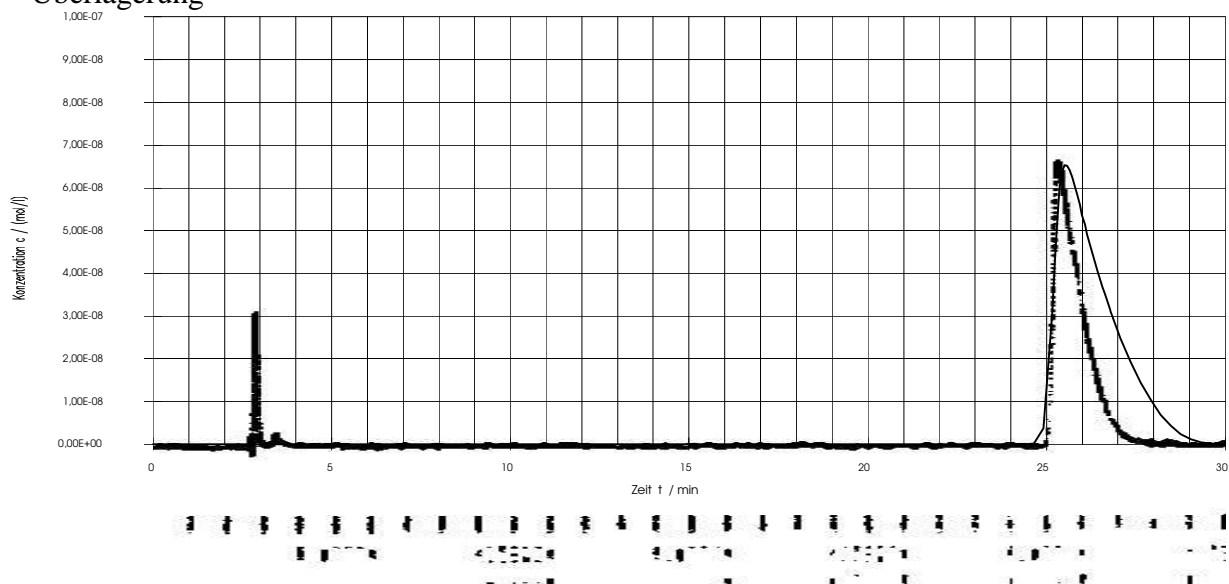
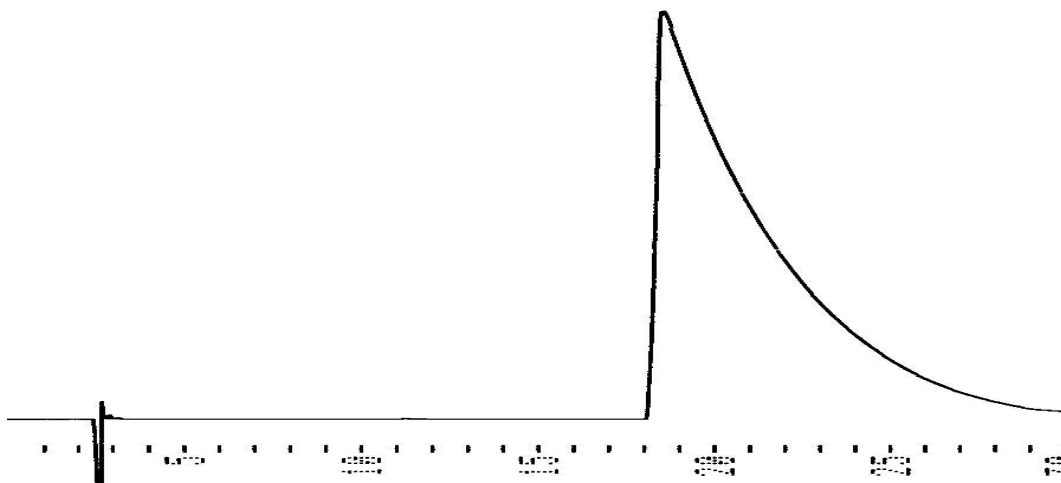
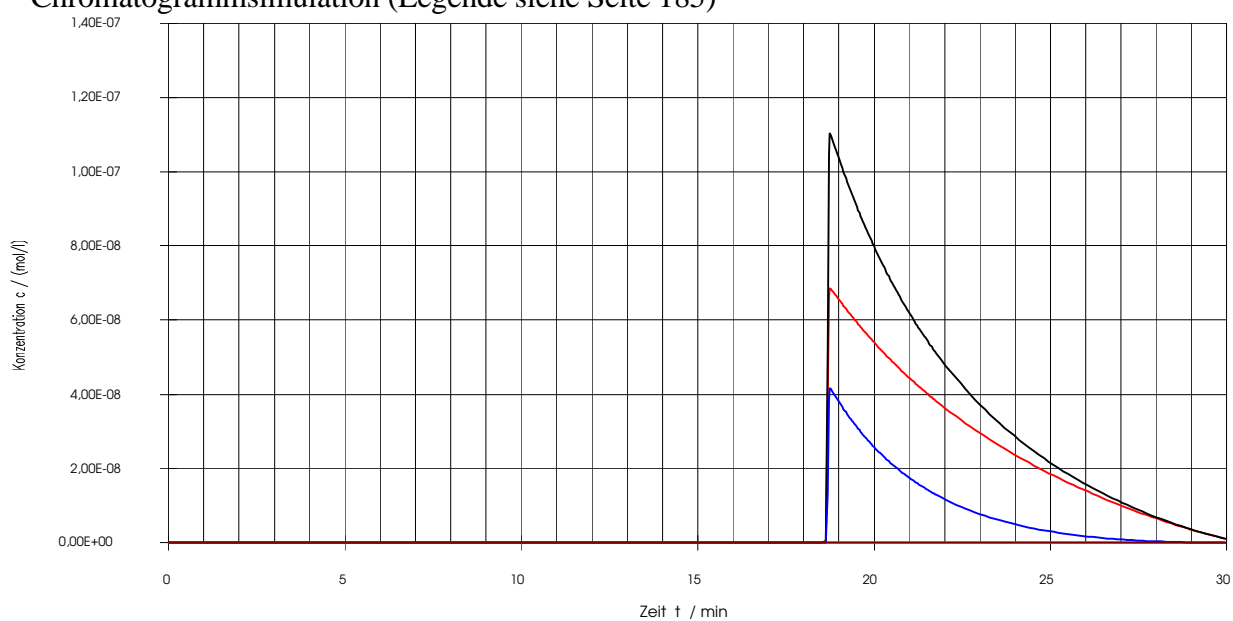


Abb. A100 : Trögersche Base Aufgabe : 100  $\mu\text{g}$ , 100 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

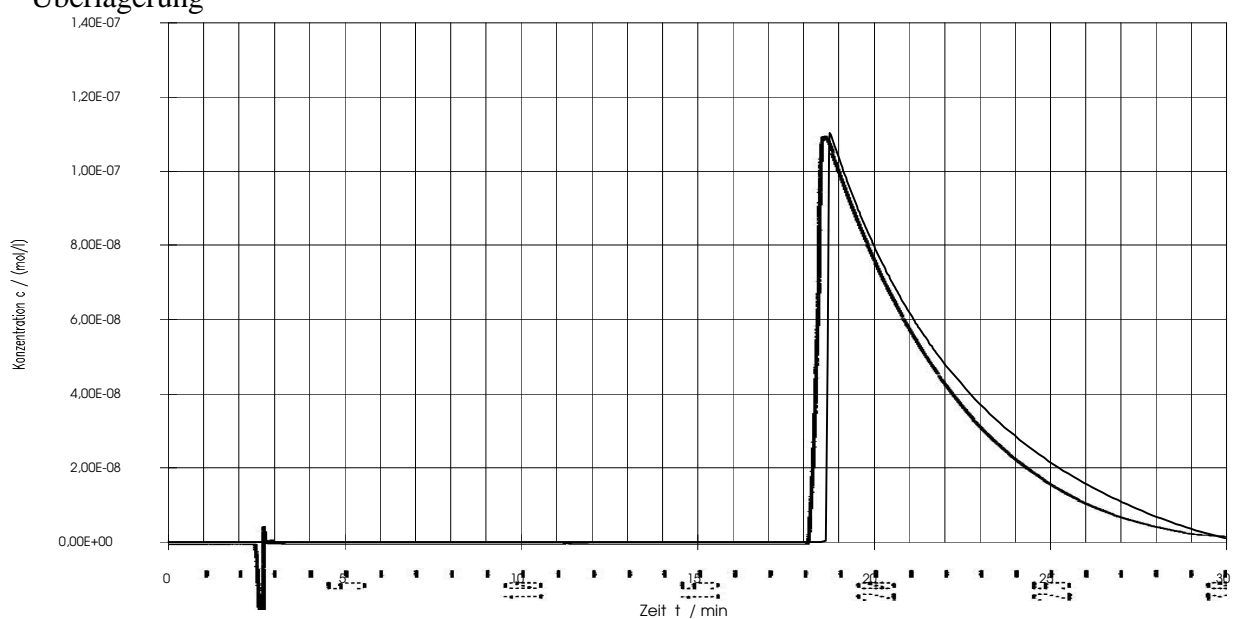
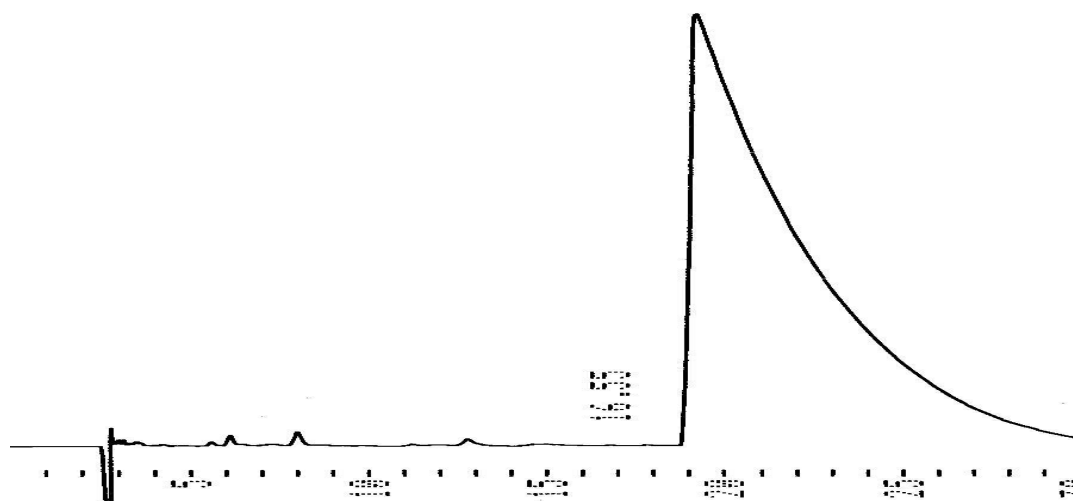
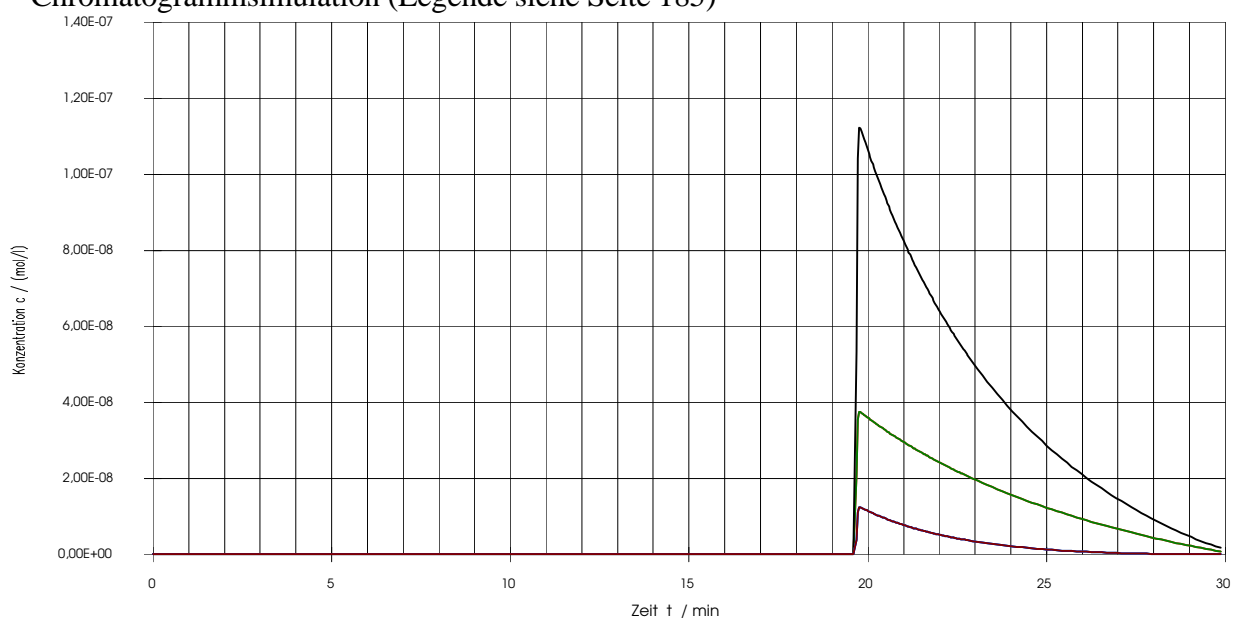


Abb. A101 : Trögersche Base Aufgabe : 100  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

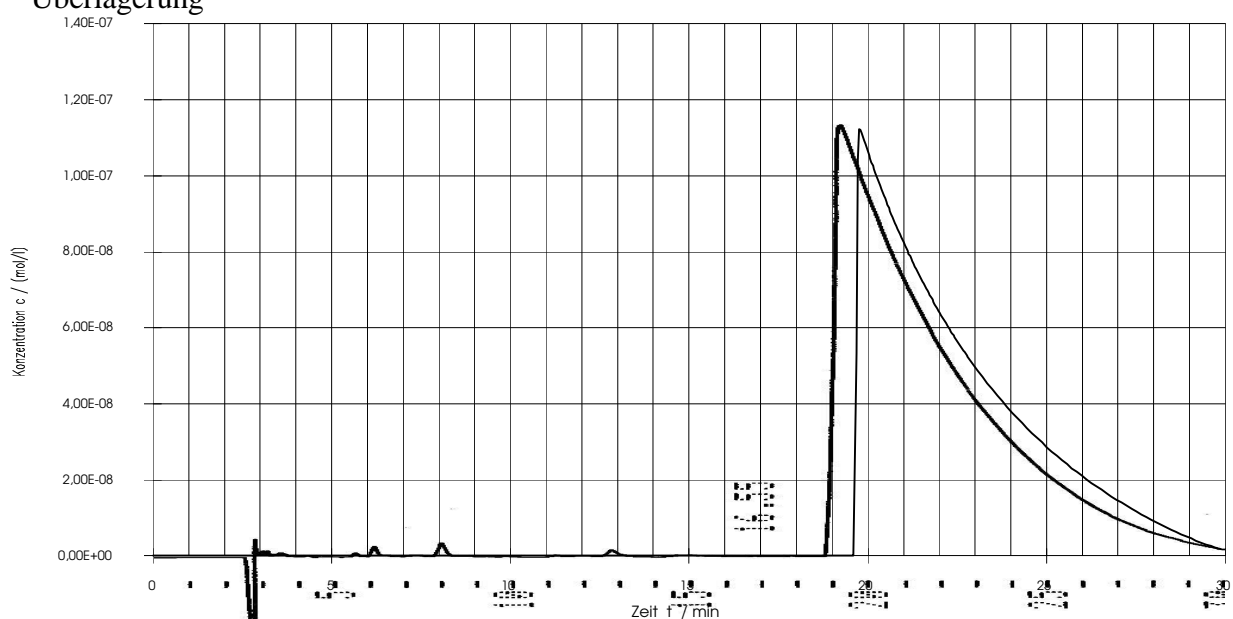
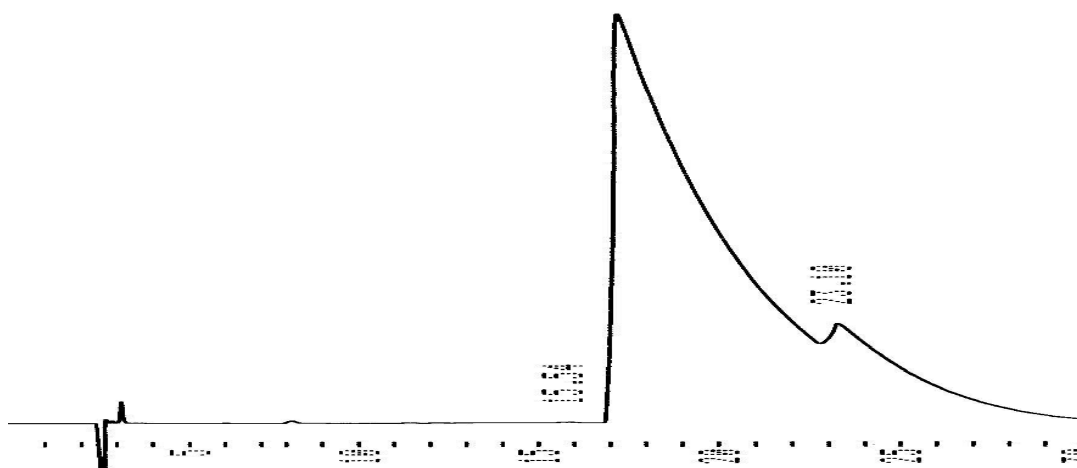
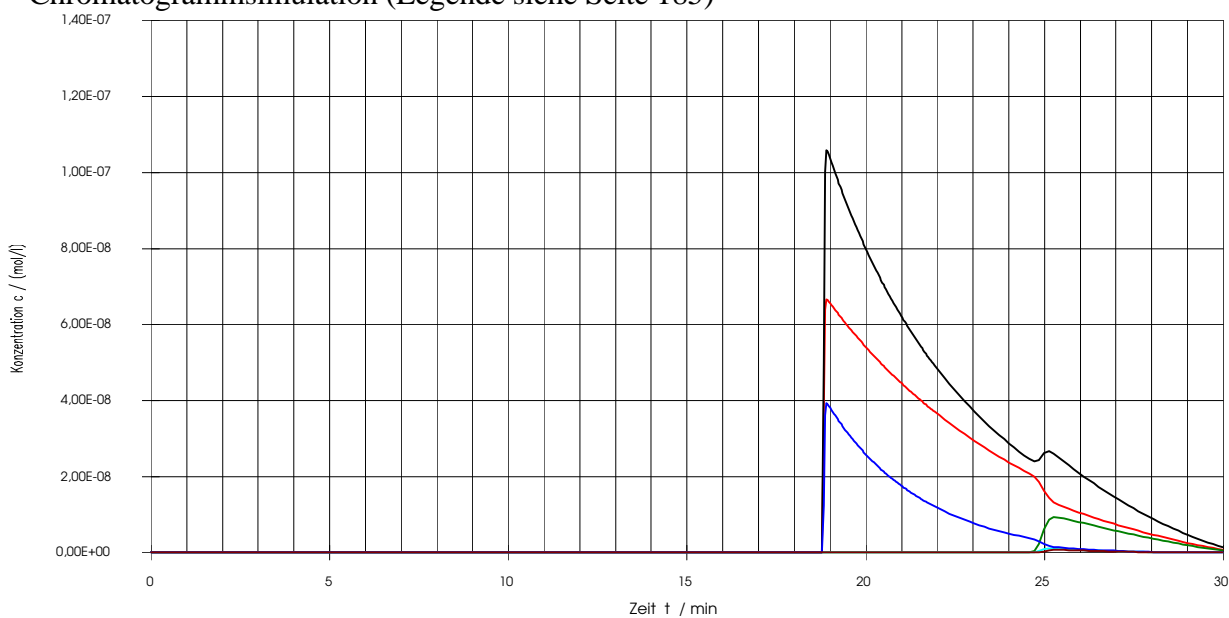


Abb. A102 : Trögersche Base Aufgabe : 100  $\mu\text{g}$ , 86 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

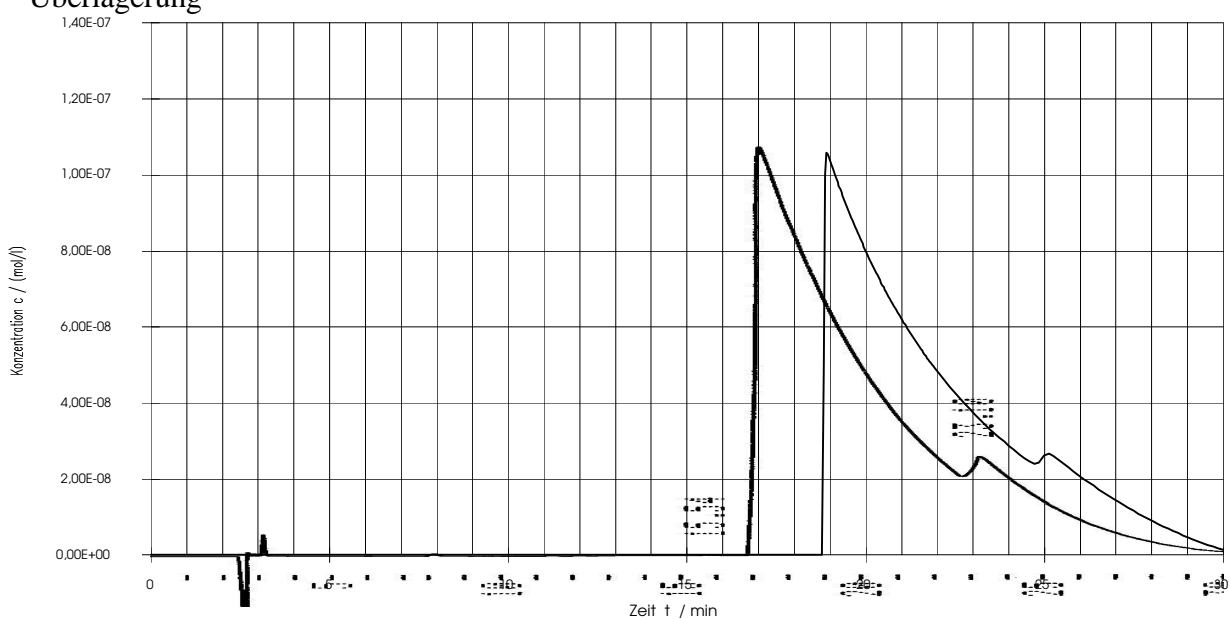
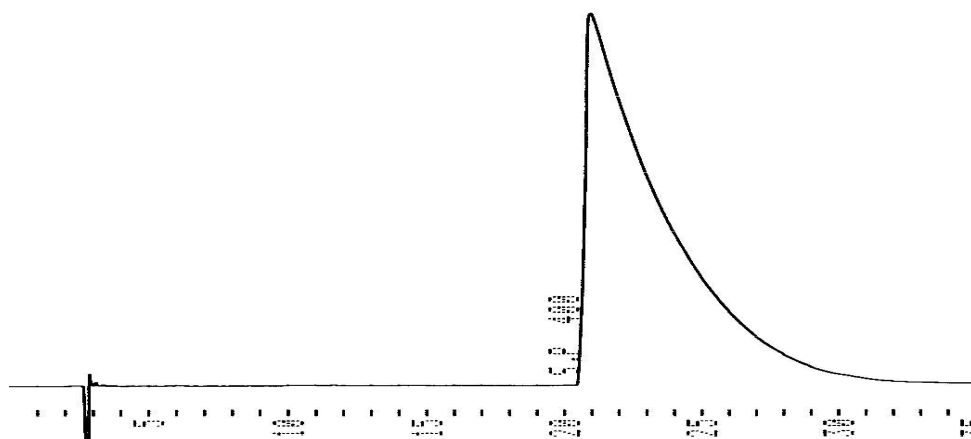
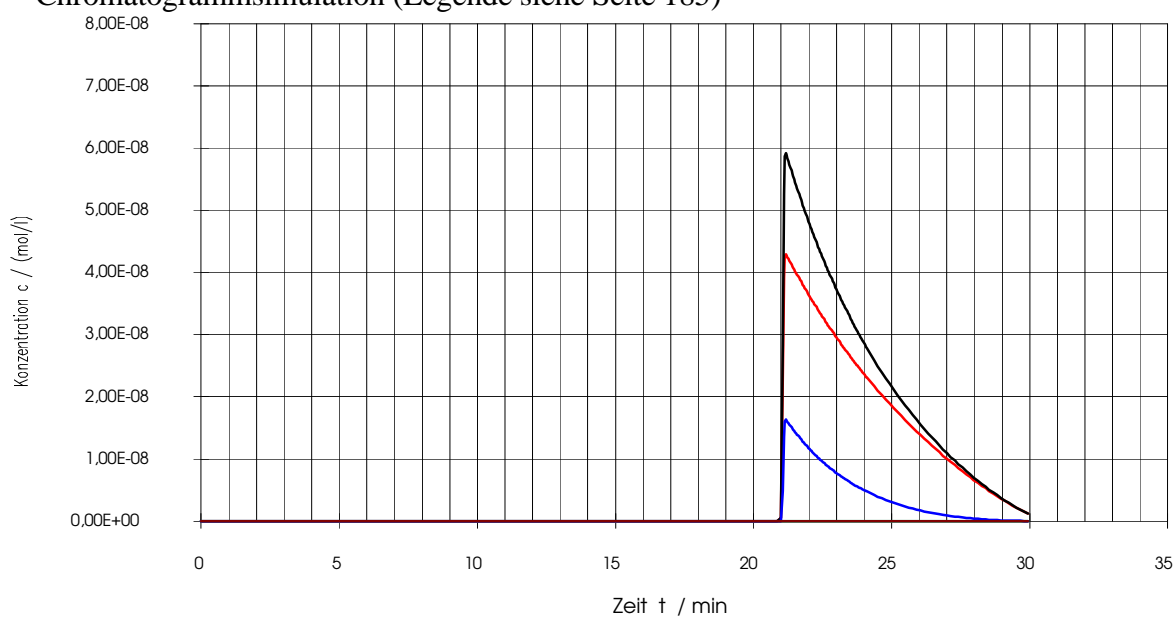




Abb. A103 : Trögersche Base Aufgabe : 50  $\mu\text{g}$ , 100 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

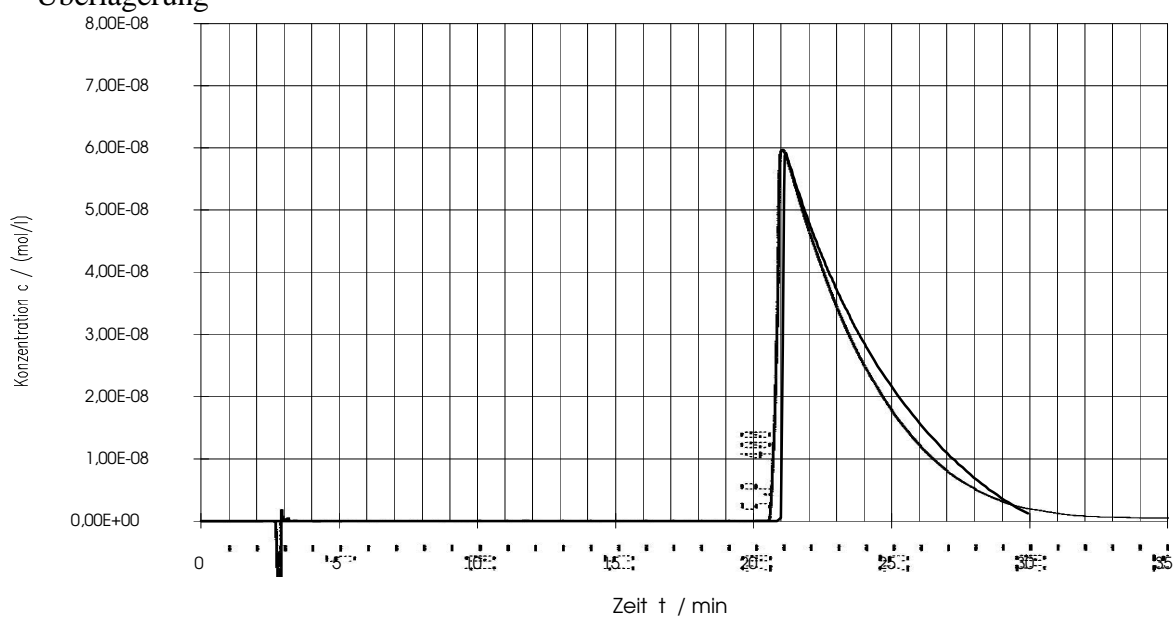
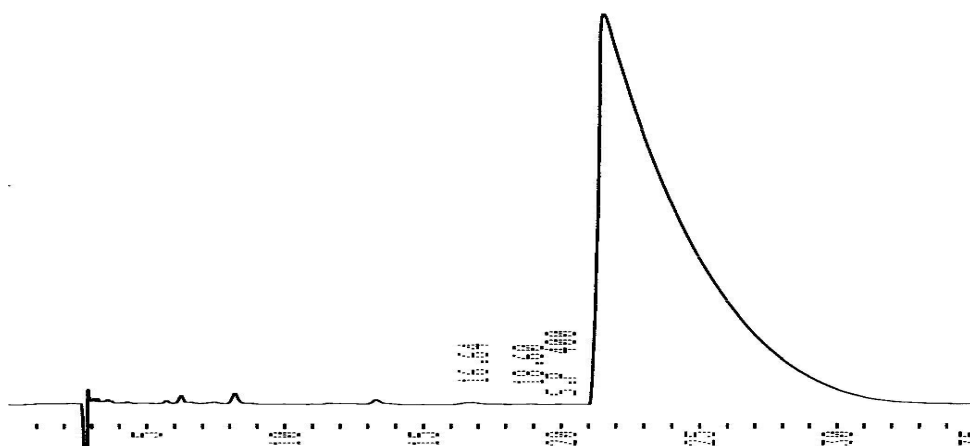
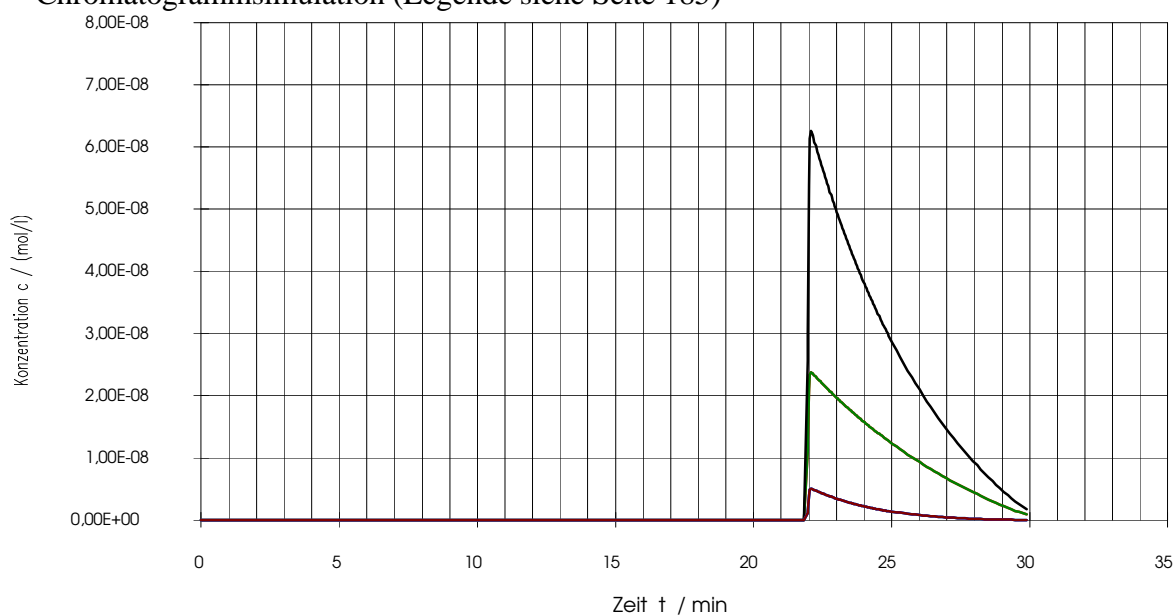


Abb. A104 : Trögersche Base Aufgabe : 50  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

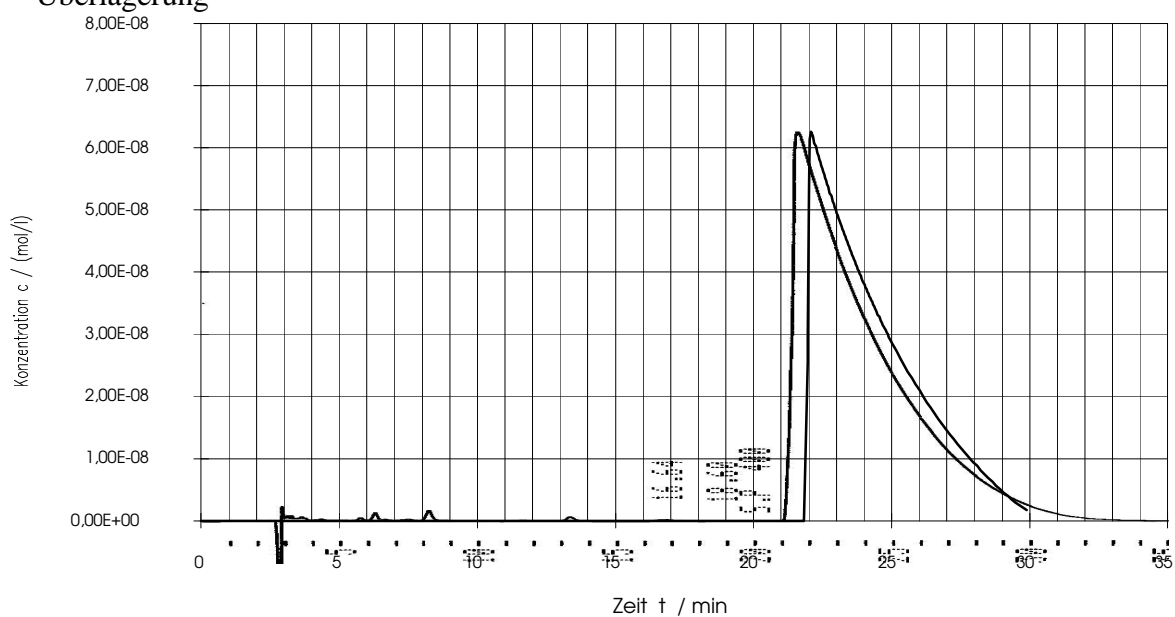
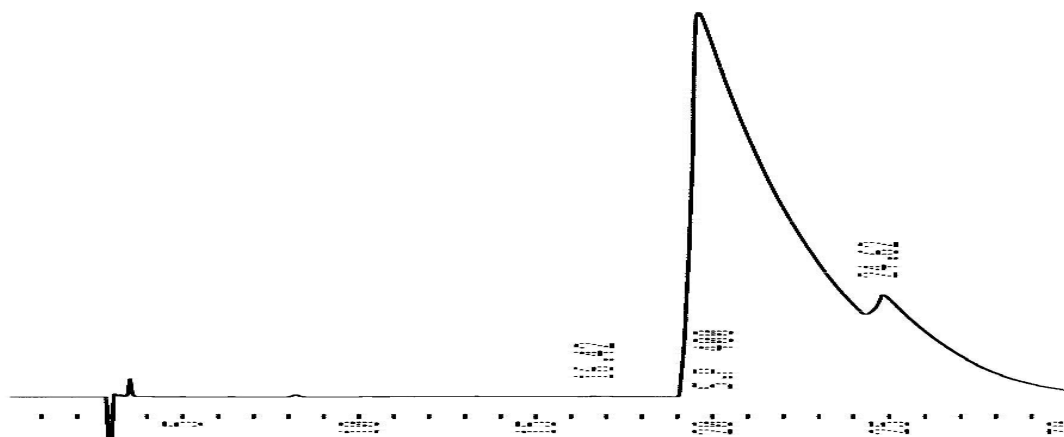
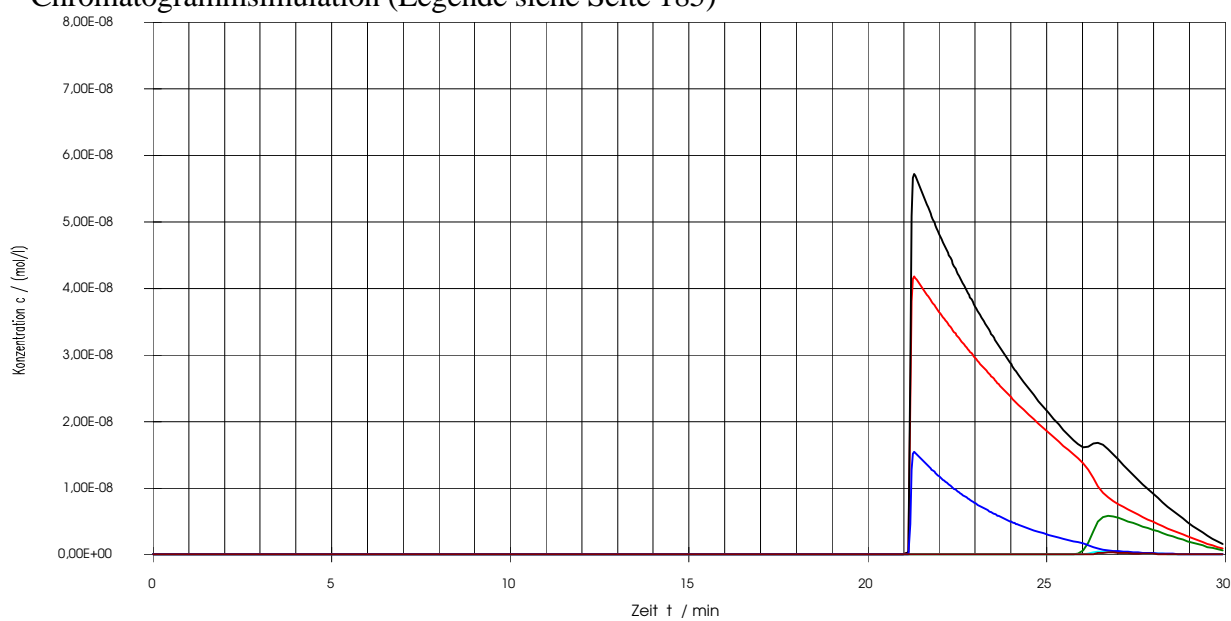


Abb. A105 : Trögersche Base Aufgabe : 50  $\mu\text{g}$ , 86 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

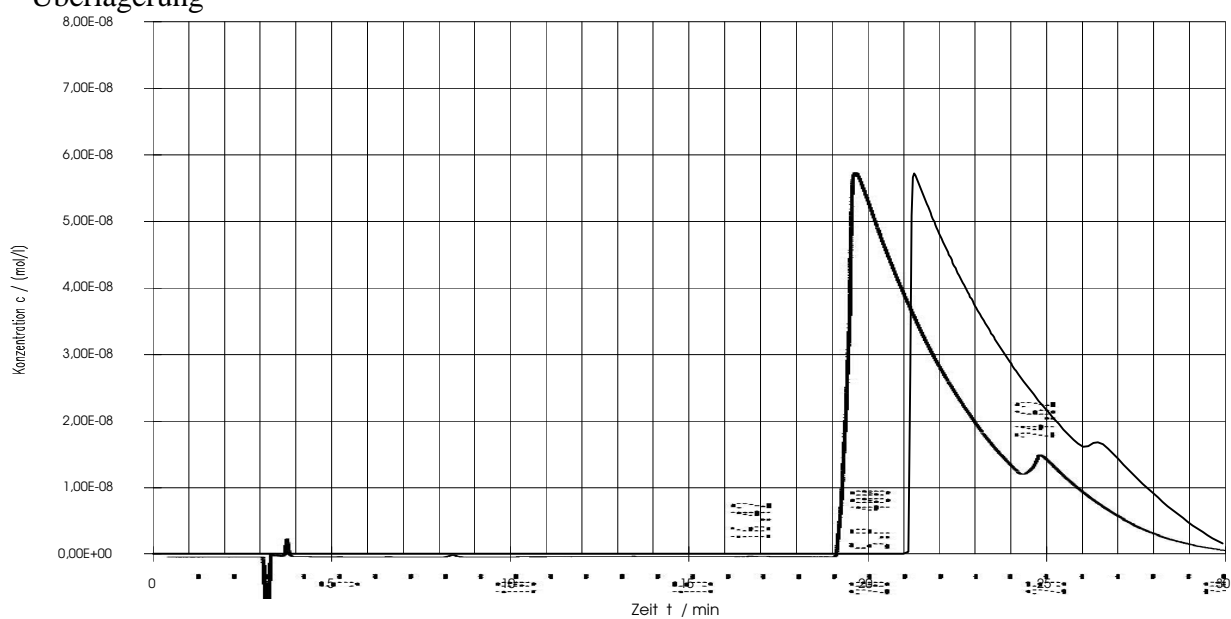
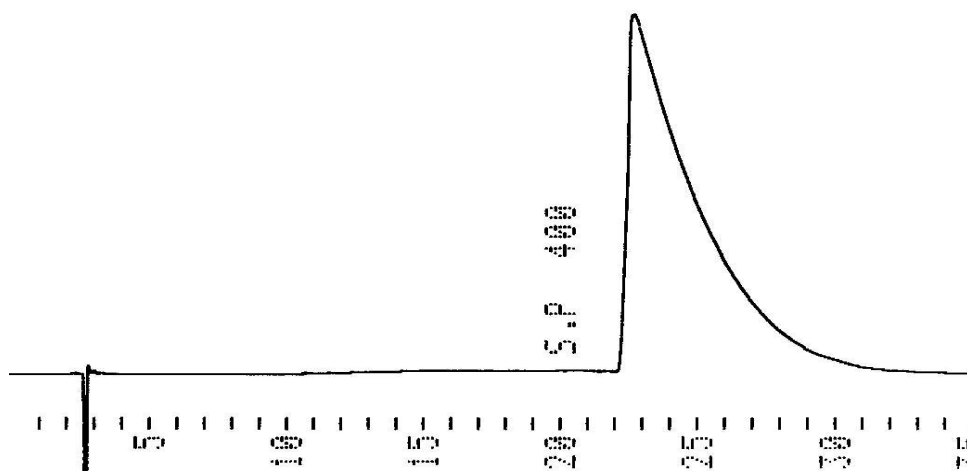
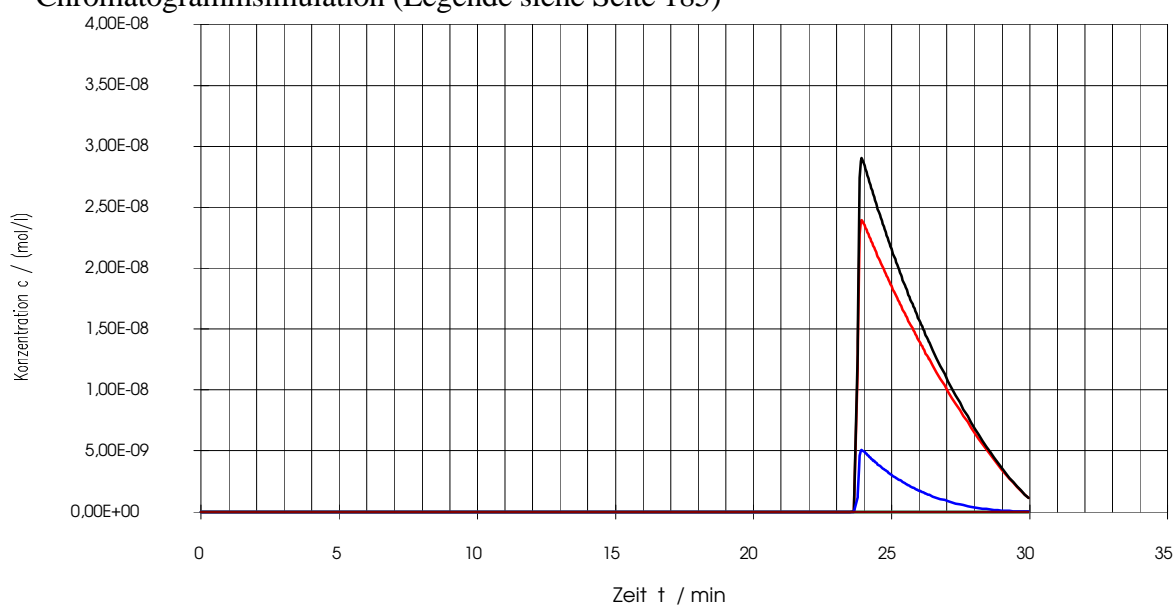


Abb. A106 : Trögersche Base Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 100 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

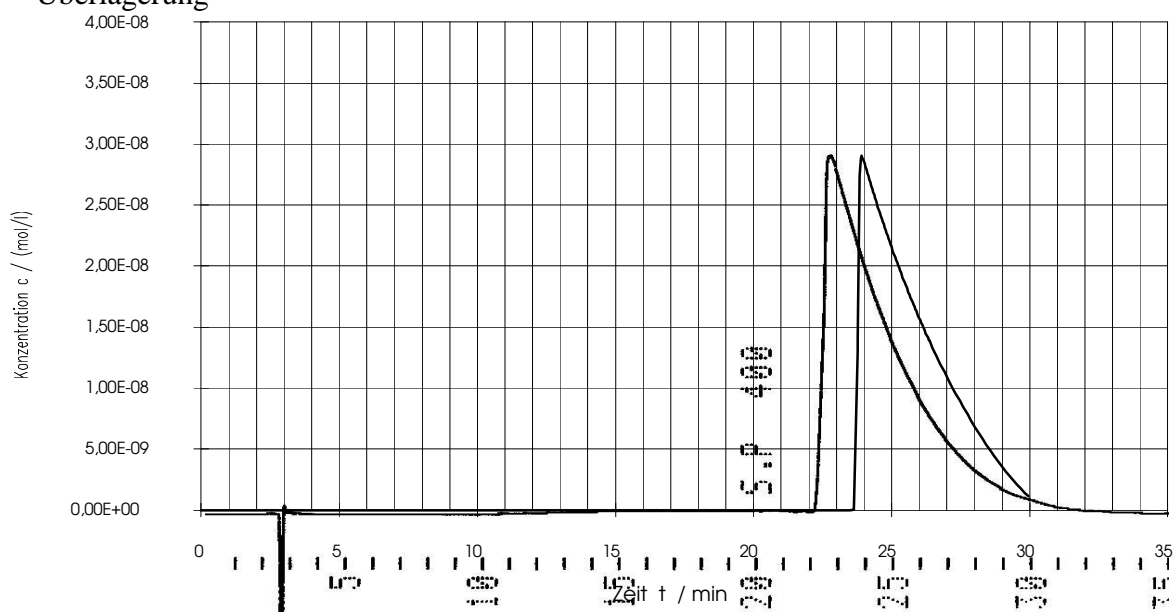
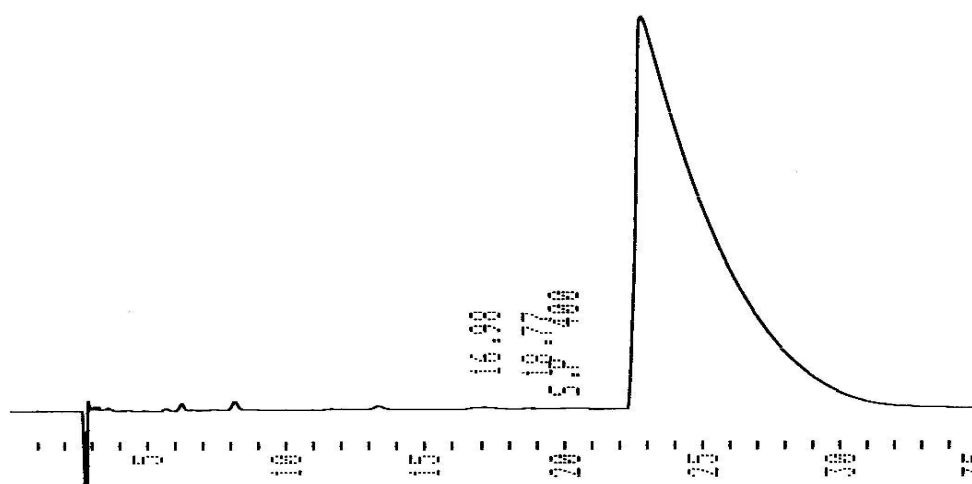
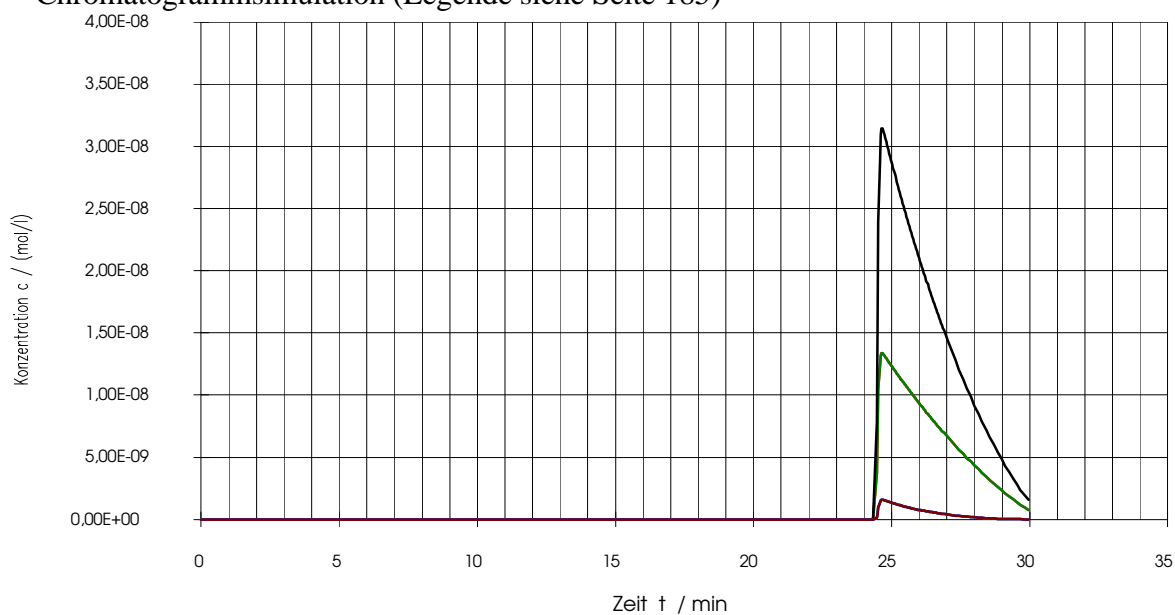


Abb. A107 : Trögersche Base Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

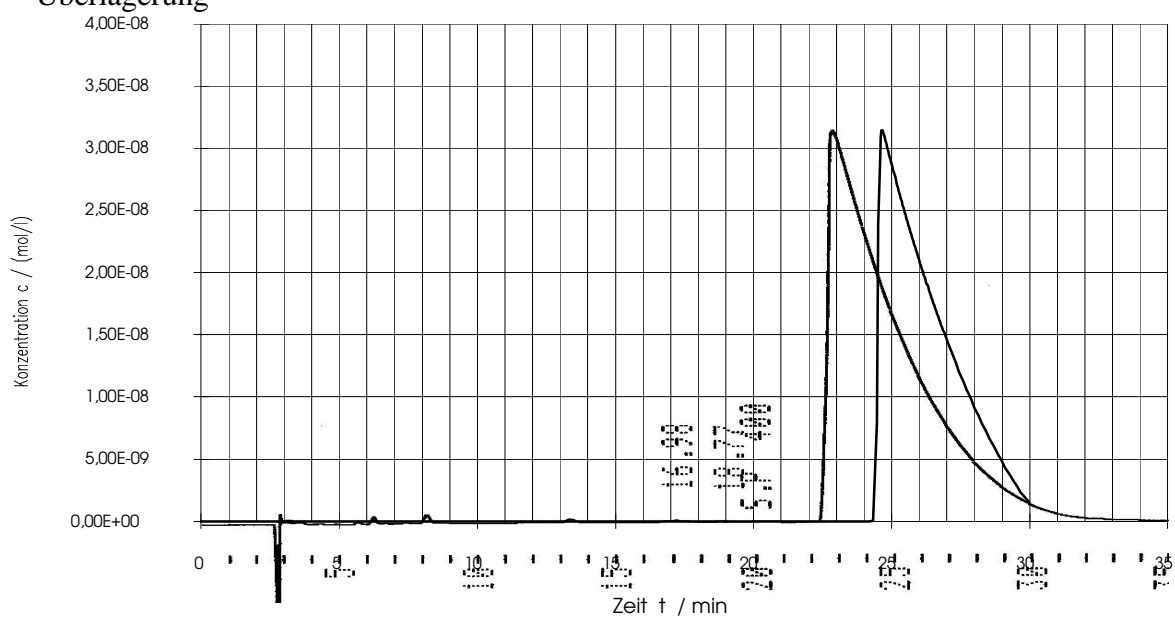
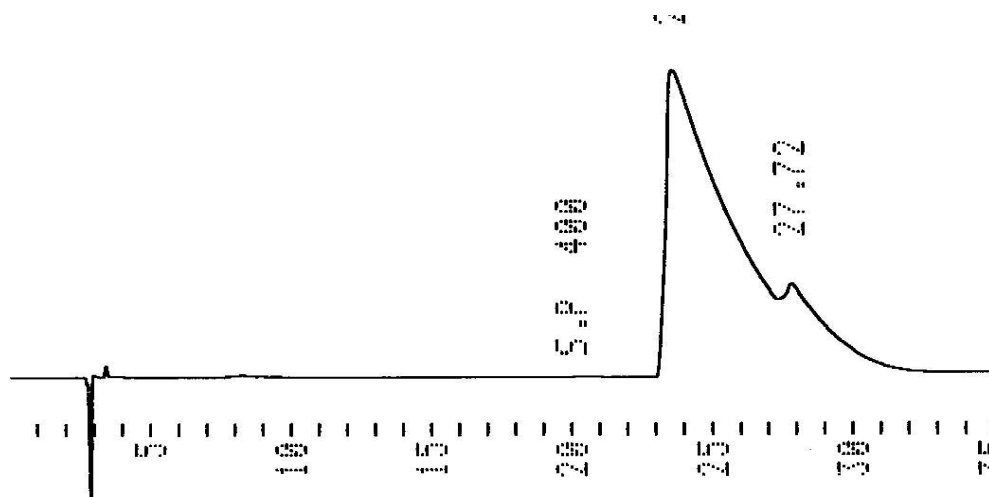
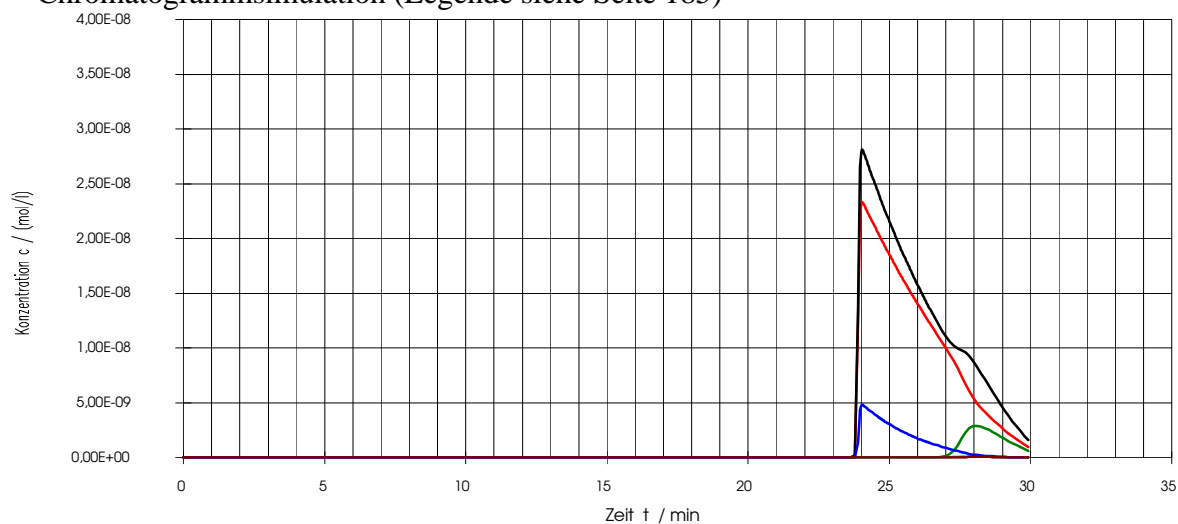


Abb. A108 : Trögersche Base Aufgabe : 20  $\mu\text{g}$ , 86 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

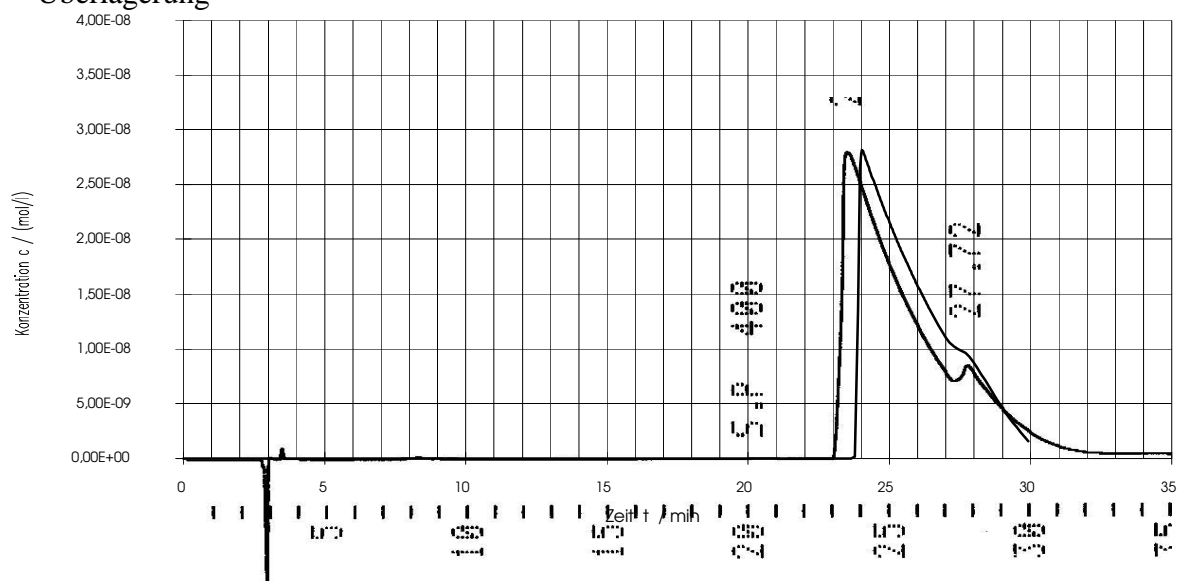
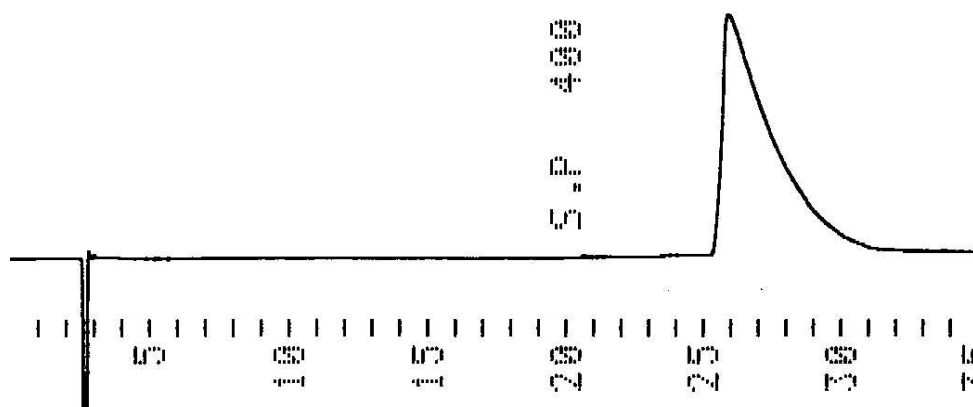
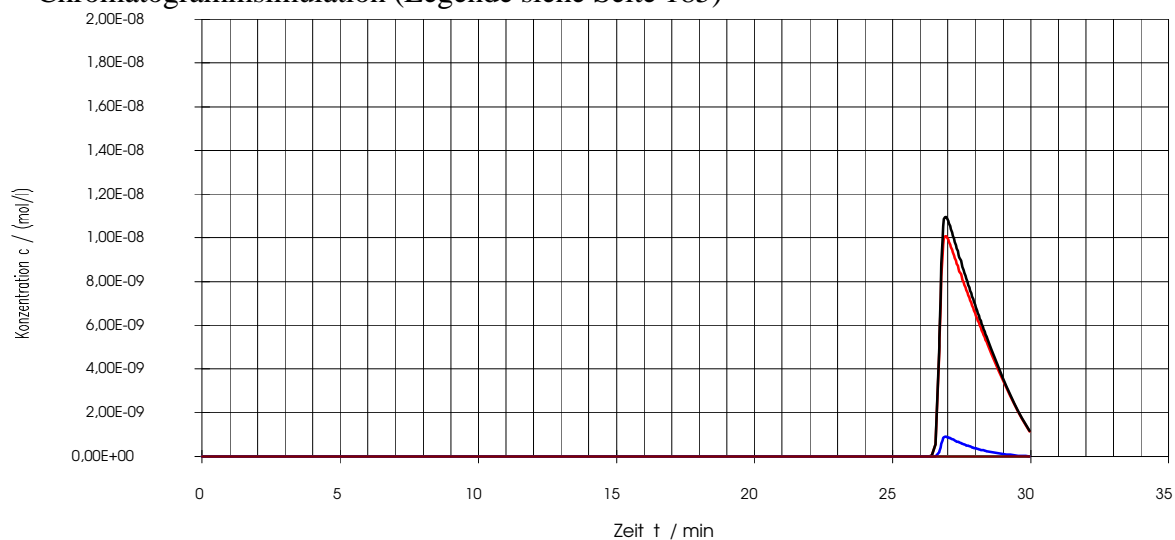


Abb. A109 : Trögersche Base Aufgabe : 5  $\mu$ g, 100 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

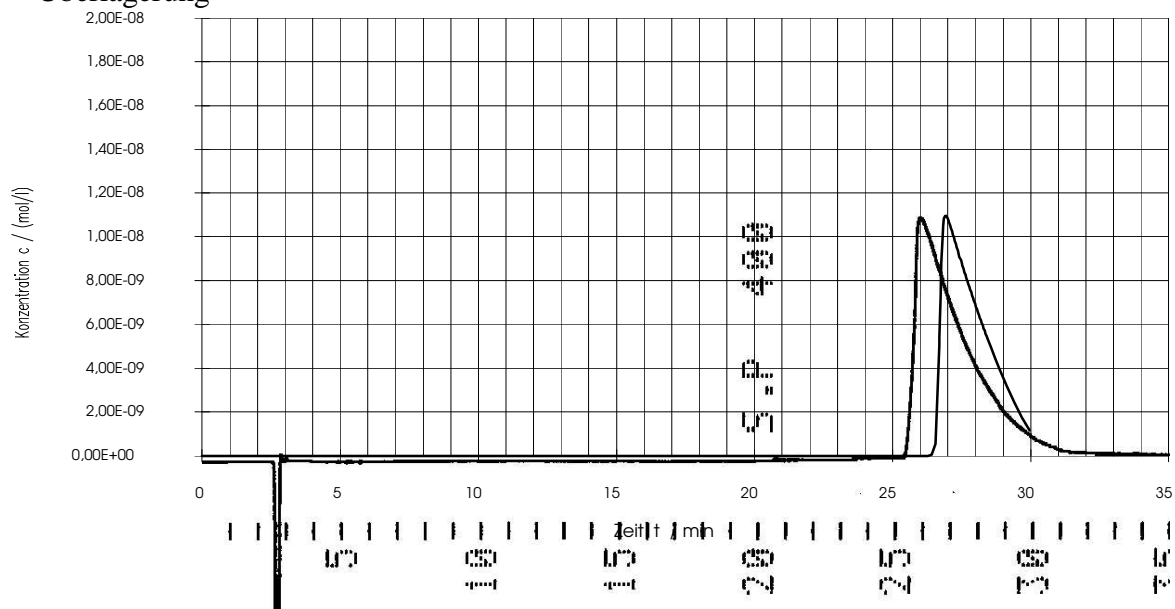
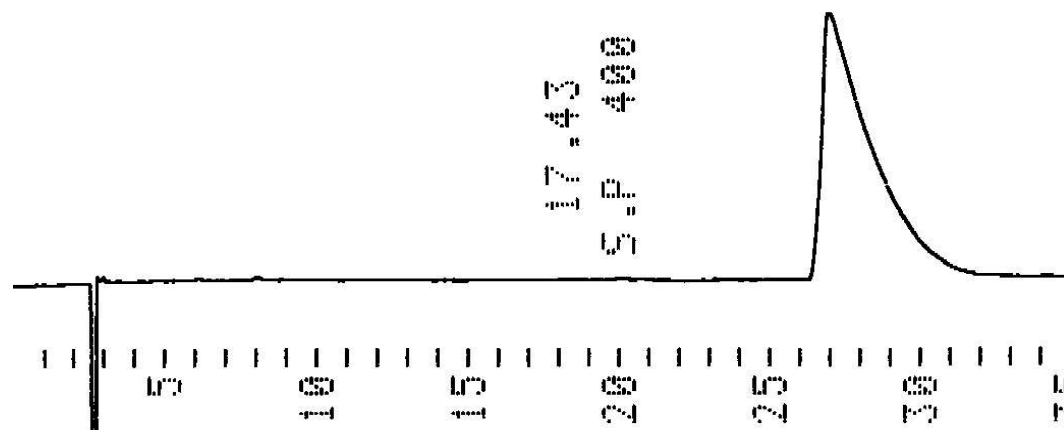
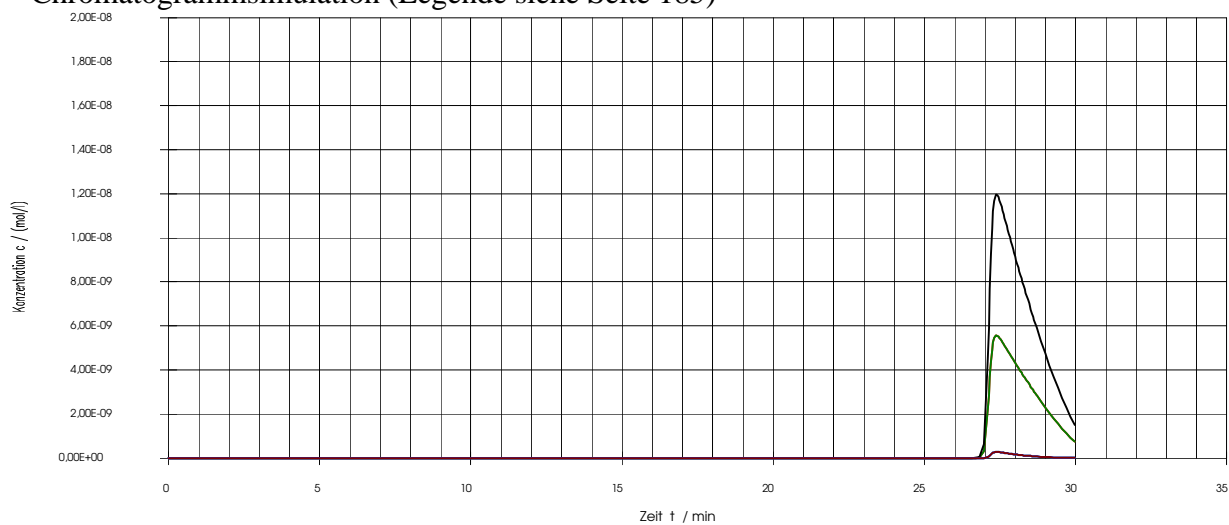


Abb. A110 : Trögersche Base Aufgabe : 5  $\mu\text{g}$ , 0 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung

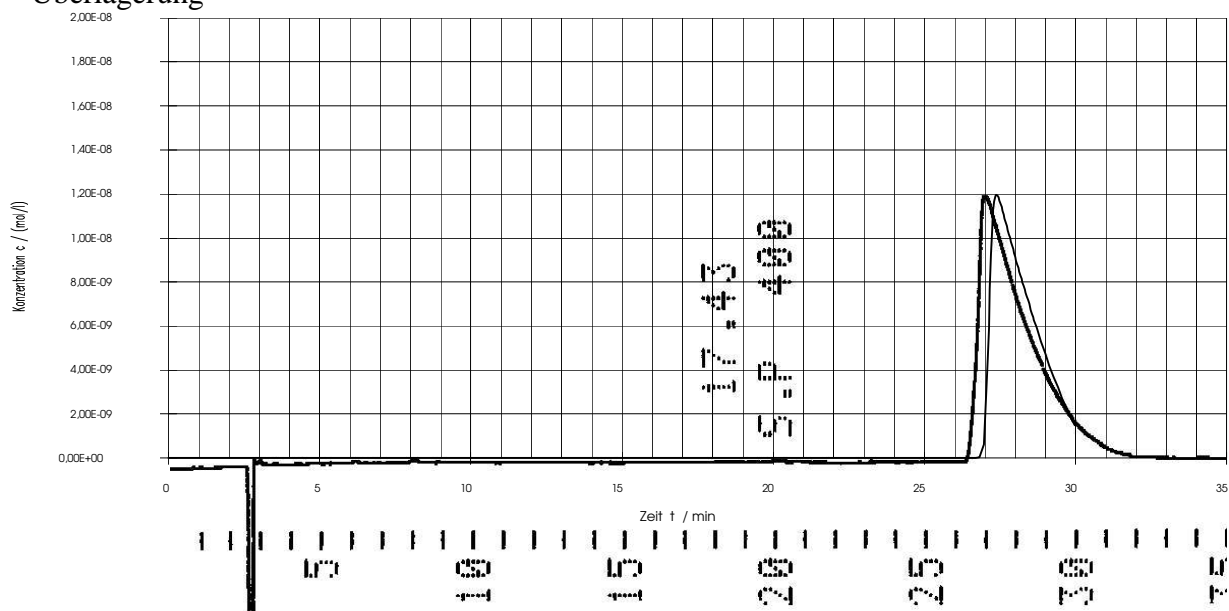
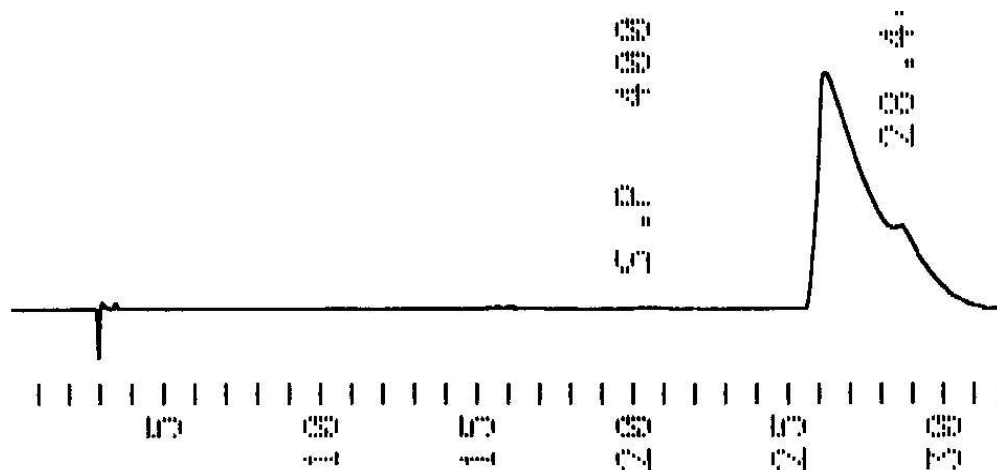
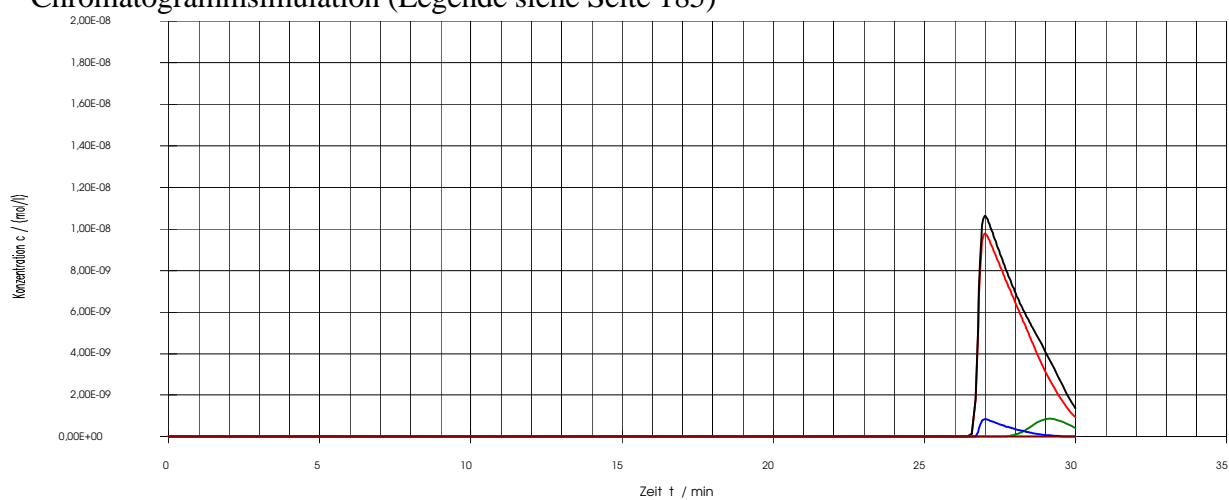




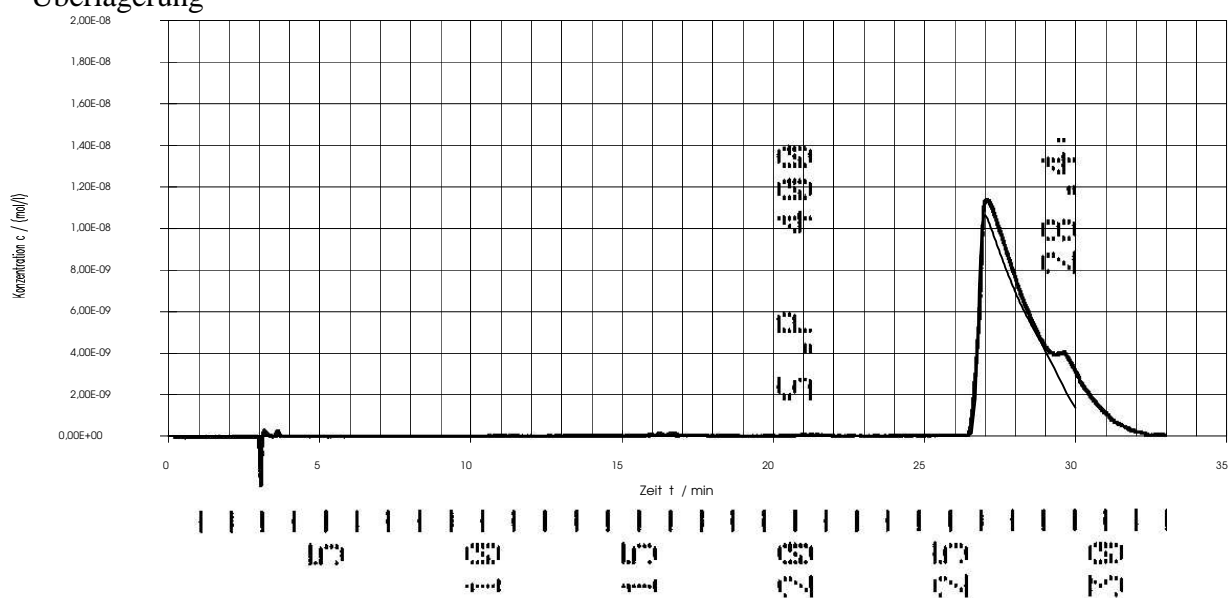
Abb. A111 : Trögersche Base Aufgabe : 5  $\mu\text{g}$ , 86 %ee experimentelles Chromatogramm aus [4]



Chromatogrammsimulation (Legende siehe Seite 185)



Überlagerung



**Anhang B :**  
**Abbildungen zur Energieabhängigkeit der Rotation der OH-Gruppen des**  
**1,1'-Bi-2-naphthols**

Abbildung B1 : Graphiken zur Variation der Torsionswinkel  $t_1$  und  $t_2$  1,1'-Bi-2-naphthol für das AM1-Verfahren

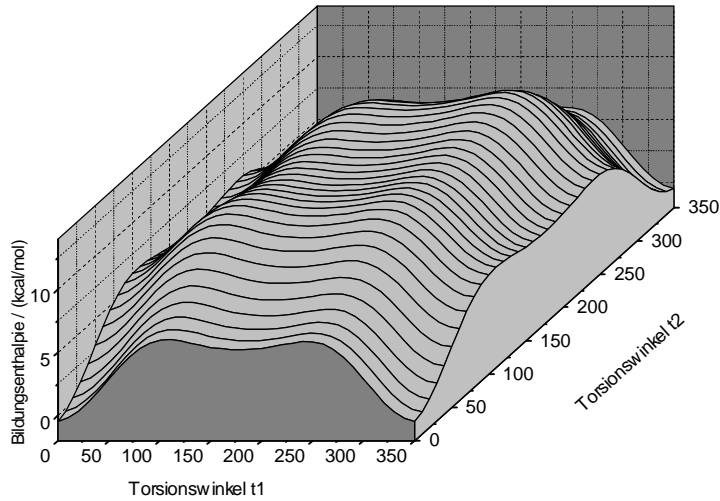


Abbildung B1 a : Auftragung der Bildungsenthalpie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln  $t_1$  und  $t_2$

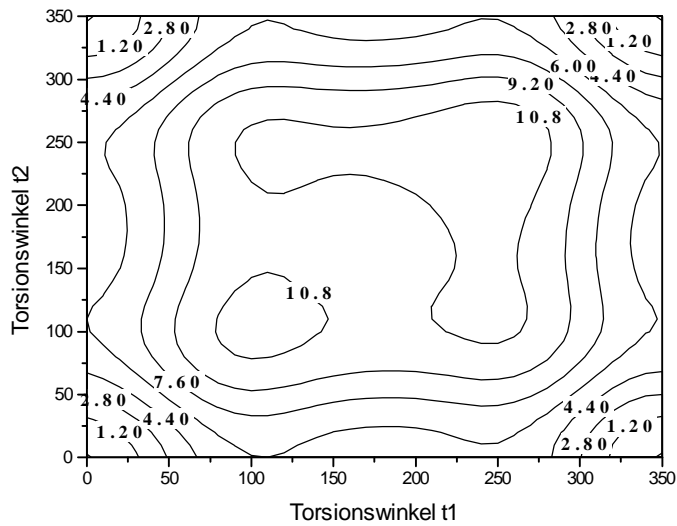


Abbildung B1 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenthalpie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln  $t_1$  und  $t_2$

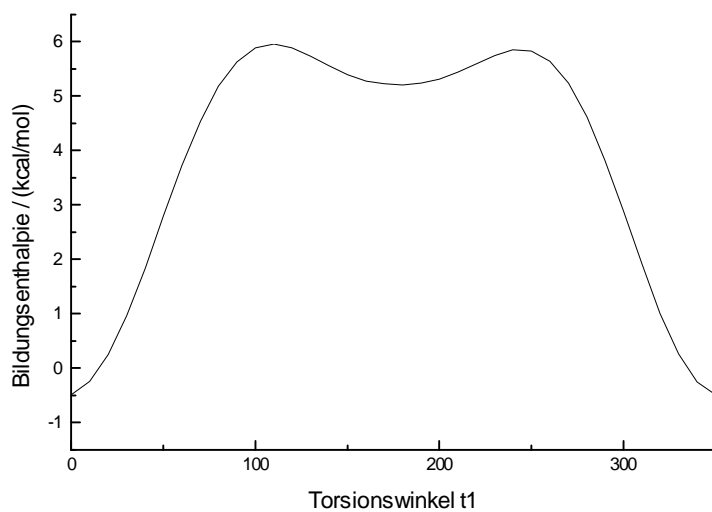


Abbildung B1 c : Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel  $t_1$

Abbildung B2 : Graphiken zur Variation derTorsionswinkel t1 und t2 1,1'-Bi-2-naphthol für das AMBER-Verfahren

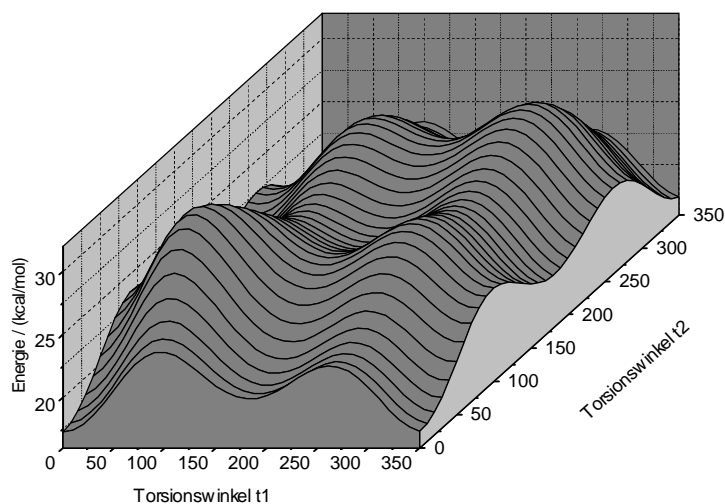


Abbildung B2 a : Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

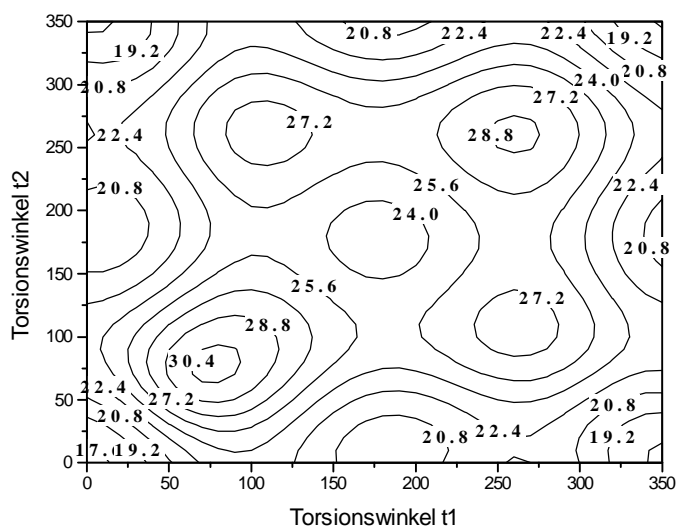


Abbildung B2 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

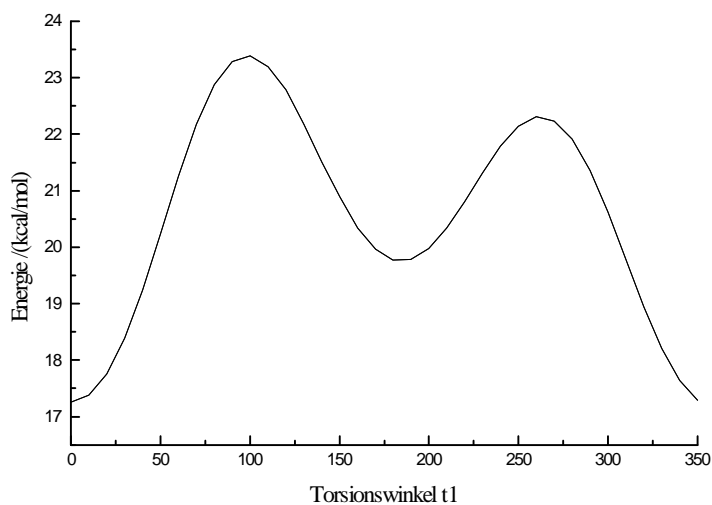


Abbildung B2 c :Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel t1

Abbildung B3 : Graphiken zur Variation derTorsionswinkel t1 und t2 1,1'-Bi-2-naphthol für das AMBER-Verfahren mit aufgesetzten AM1-Ladungen

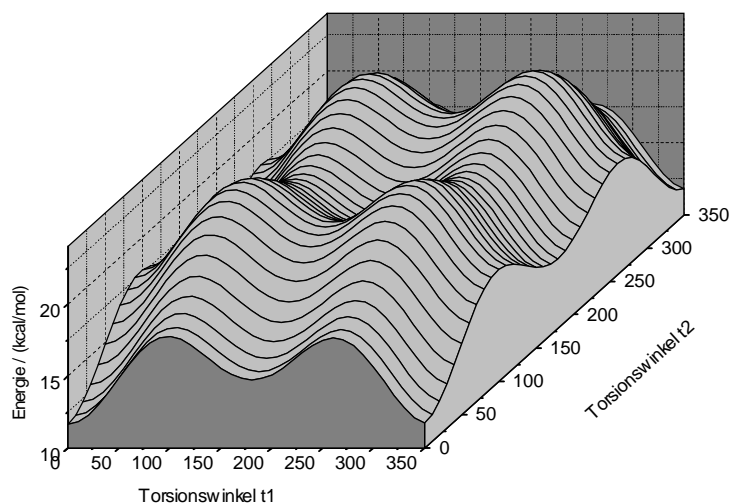


Abbildung B3 a : Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

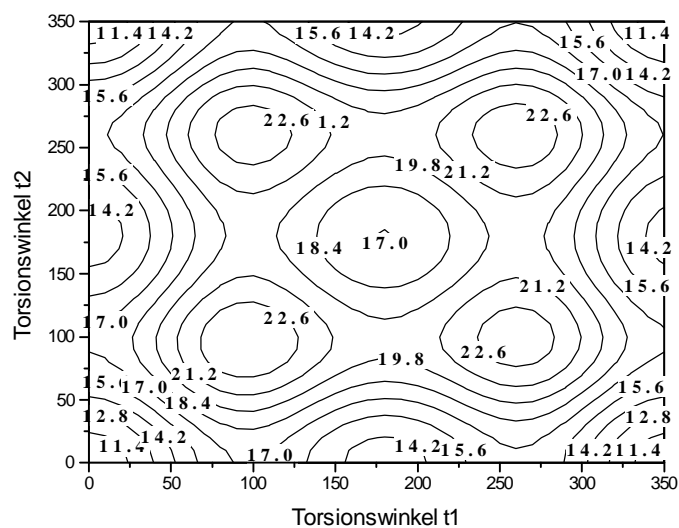


Abbildung B3 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

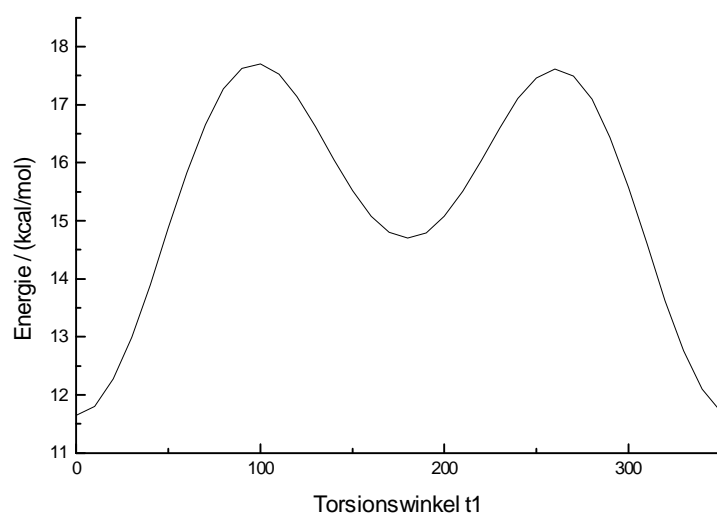


Abbildung B3 c :Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel t1

Abbildung B4 : Graphiken zur Variation der Torsionswinkel t1 und t2 1,1'-Bi-2-naphthol für das MM2-Verfahren

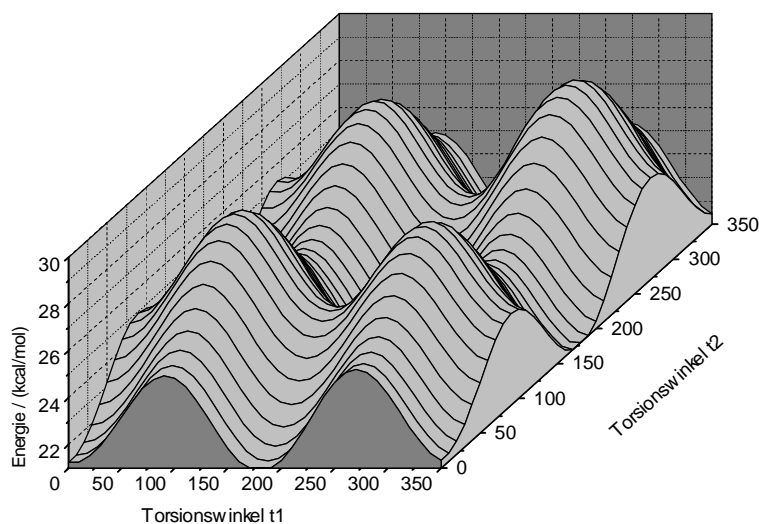


Abbildung B4 a : Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

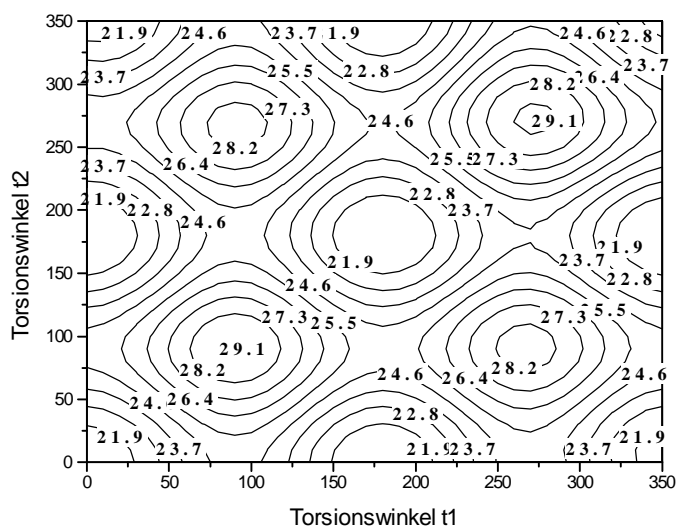


Abbildung B4 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

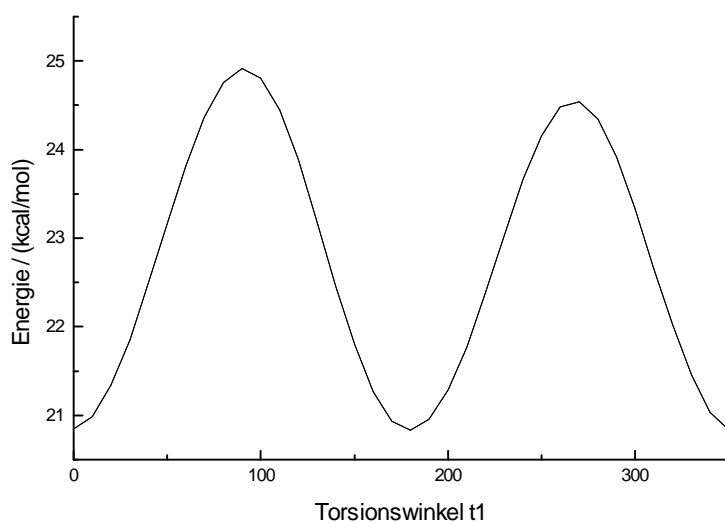


Abbildung B4 c : Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel t1

Abbildung B5 : Graphiken zur Variation derTorsionswinkel t1 und t2 1,1'-Bi-2-naphthol für das MM2-Verfahren mit aufgesetzten AM1-Ladungen

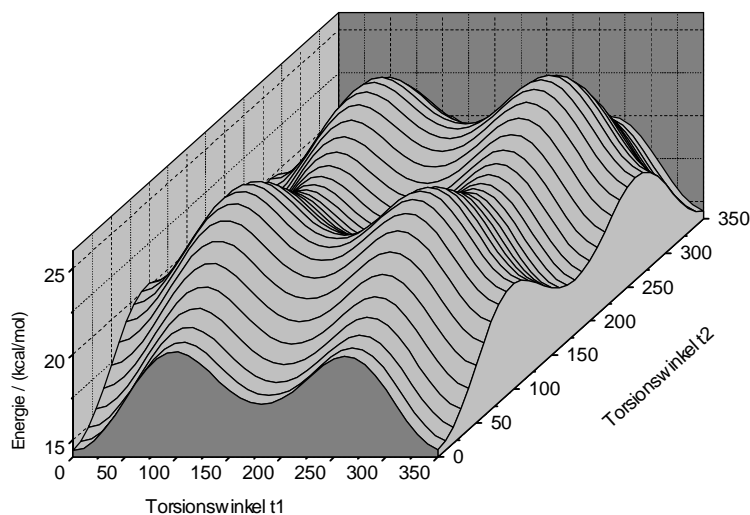


Abbildung B5 a : Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

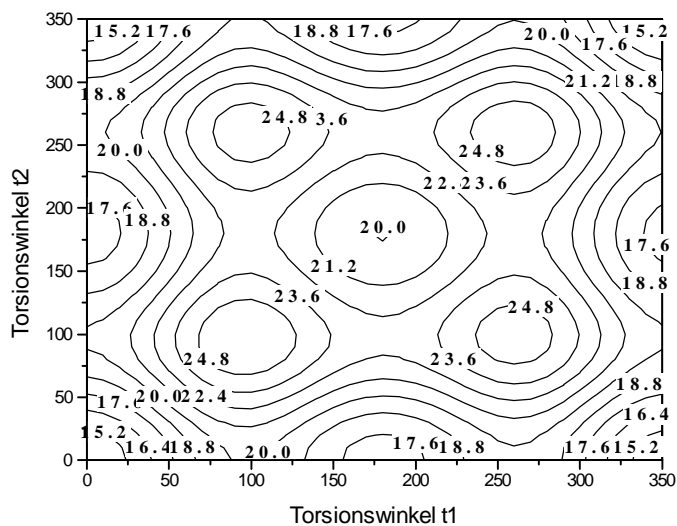


Abbildung B5 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

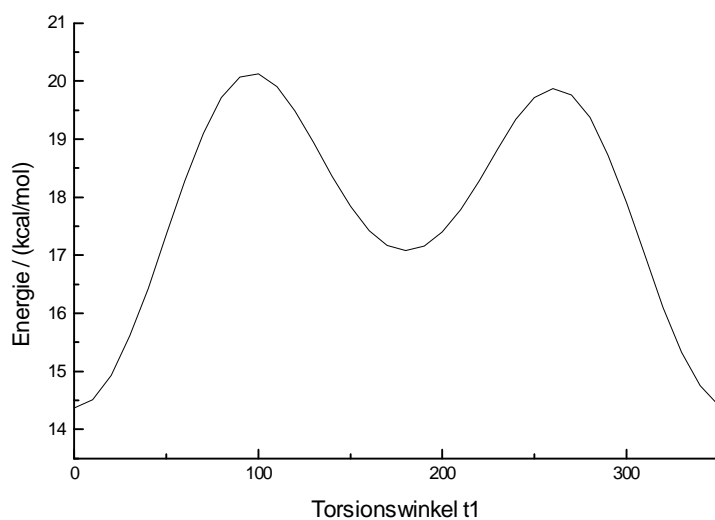


Abbildung B5 c :Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel t1

Abbildung B6 : Graphiken zur Variation derTorsionswinkel t1 und t2 1,1'-Bi-2-naphthol für das MM3-Verfahren

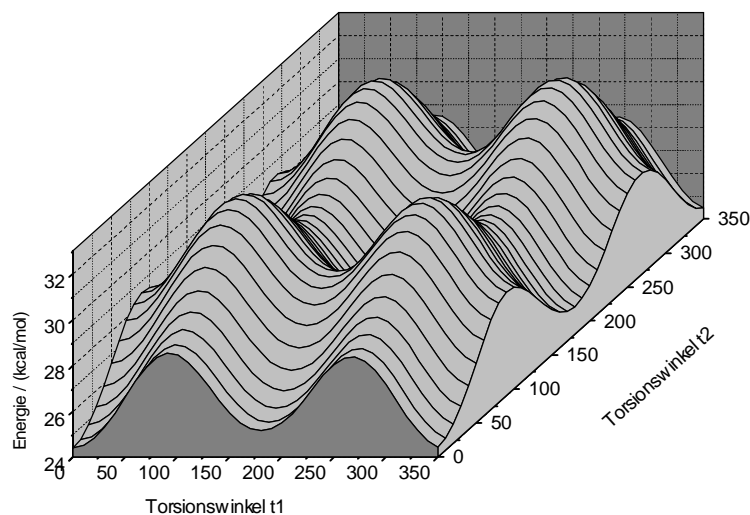


Abbildung B6 a : Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

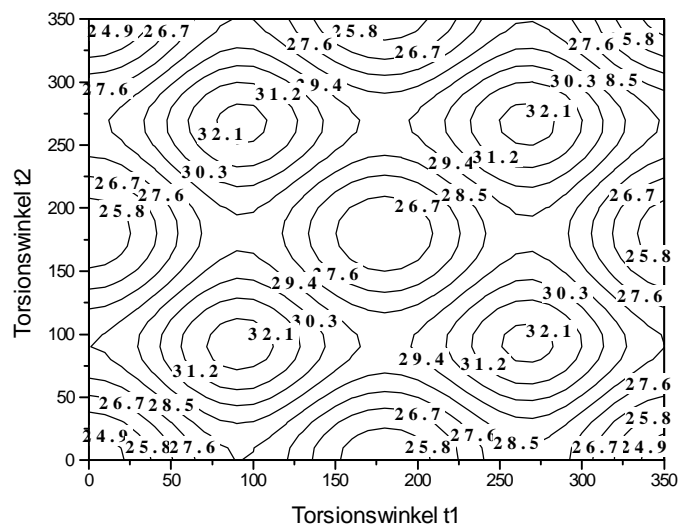


Abbildung B6 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

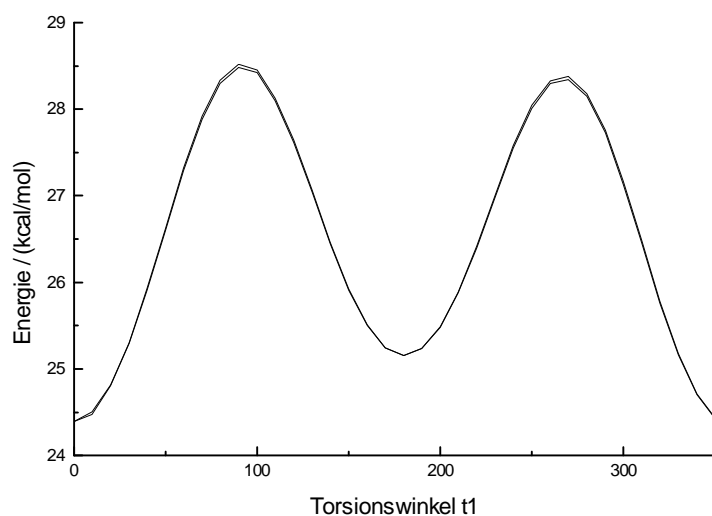


Abbildung B6 c :Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel t1



Abbildung B7 : Graphiken zur Variation der Torsionswinkel t1 und t2 1,1'-Bi-2-naphthol für das MM3-Verfahren mit aufgesetzten AM1-Ladungen

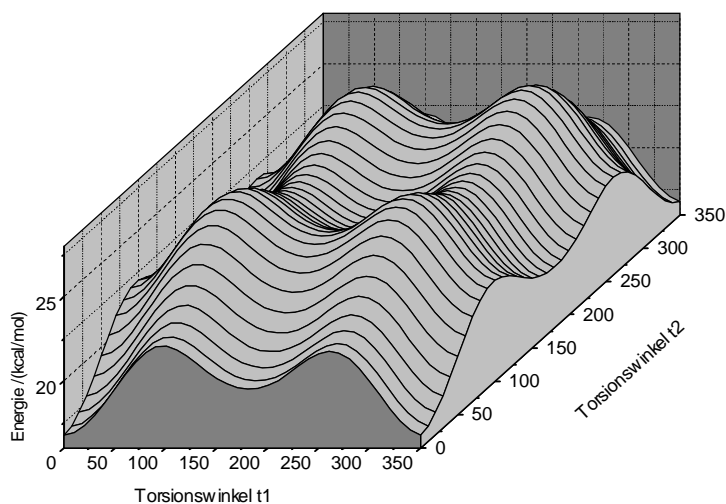


Abbildung B7 a : Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

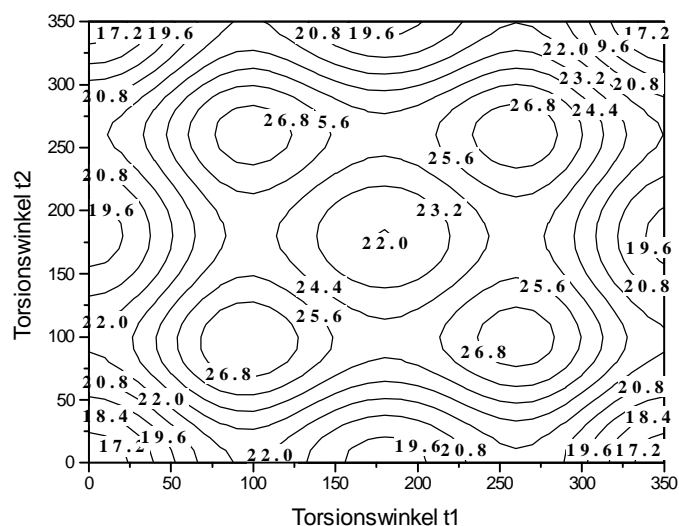


Abbildung B7 b : Konturliniendiagramm der Auftragung der Bildungsenergie in Abhängigkeit von den Torsionswinkeln t1 und t2

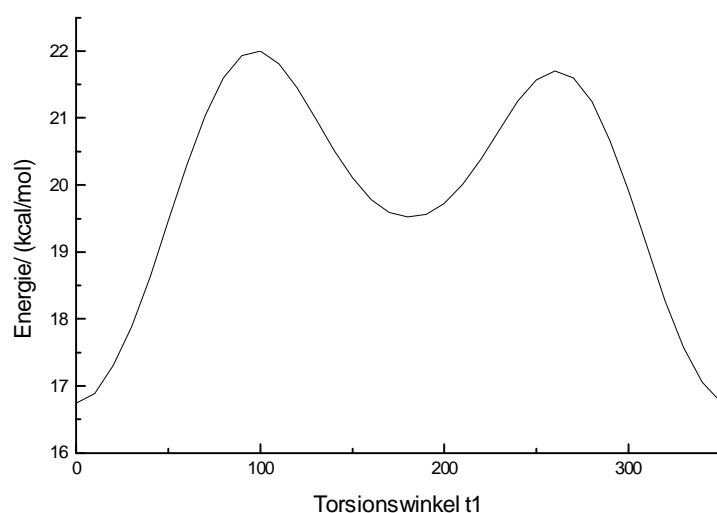


Abbildung B7 c : Auftragung der niedrigsten Konformationsenergie bei vorgegebenem Torsionswinkel t1

## Anhang C : Tabellen und Abbildungen zu den berechneten Aminosäureester-Aggregaten

Anmerkungen zur Namensgebung der Aggregate in den Tabellen und sonstige Abkürzungen

As : allgemeine Abkürzung für ein N-Acyl-Aminosäureestermolekül

Pa : Abkürzung für ein Propylaminmolekül

Al : Abkürzung für ein Isopropanolmolekül

Die in den Tabellen aufgeführten Namen setzen sich zusammen aus:

Tabelle C1-C18 : Aminosäureesterabkürzung gefolgt von der Abkürzung für den jeweiligen Wechselwirkungspartner und der Abkürzung für das zugrunde liegende Wechselwirkungsmuster gemäß der Abbildung 111

Tabelle C19-C27 : Abkürzung für das zugrunde liegende Wechselwirkungsmuster des ersten Isopropanolmolekül zum Aminosäureester gefolgt von der entsprechenden Abkürzung für das zweite Isopropanolmolekül gemäß der Abbildung 111

Tabelle C28-C36 : Abkürzung für das zugrunde liegende Wechselwirkungsmuster des Isopropanolmolekül zum Aminosäureester gefolgt von der entsprechenden Abkürzung für das Propylaminmolekül gemäß der Abbildung 111

Tabelle C37-C54 : Aminosäureesterdimerabkürzung gefolgt von der Abkürzung für den jeweiligen Wechselwirkungspartner und der Abkürzung für das zugrunde liegende Wechselwirkungsmuster entsprechend der Abbildung 111

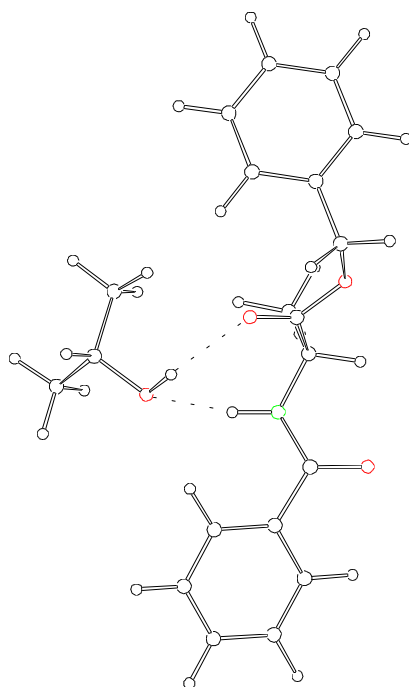
Tabelle C55-C63 : Nach dem Kürzel für das verwendete Aminosäureesterdimer folgt die Beschreibung Stereogeometrie (homochiral ss, heterochiral sr ). Hinter dem ersten Underscore '\_' steht das Kürzel für die Angriffsposition des Propylamin (e für den Angriff an Position 2 und 7, z für den Angriff an Position 3 und 6). Hinter dem zweiten Underscore befindet sich die Angabe aus welchem Quadranten das Isopropanol gemäß der Abbildung 111 angreift.

Tabelle C64-C72 : Nach dem Kürzel für das verwendete Aminosäureesterdimer folgt die Beschreibung Stereogeometrie (homochiral ss, heterochiral sr ). Hinter dem ersten Underscore '\_' steht das Kürzel für die Angriffsposition des ersten Isopropanols Al1. Hinter dem zweiten Underscore befindet sich die Angabe aus welchem Quadranten das zweite Isopropanolmolekül Al2 gemäß der Abbildung 111 angreift.

In den einzelnen Tabellen sind die Daten der jeweils berechneten Minimumsgeometrien fett hervorgehoben.

In den Abbildungen C55-C72 sind aus Gründen der Übersichtlichkeit die sonst eingezeichneten Wasserstoffbrückenbindungen weggelassen worden.

Abbildung C1 :



N-Benzoyl-alaninbenzylester-Isopropanol-Aggregat

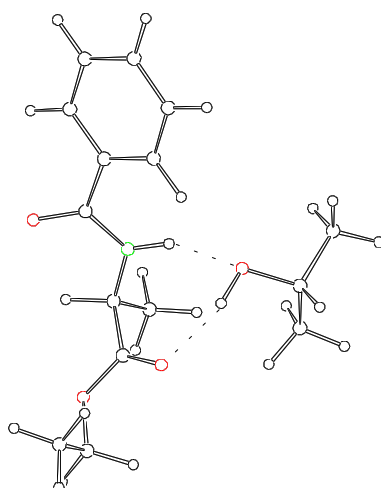
Tabelle C1 : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bb_Al_A1	-144,7	-72,74	-67,96	-4
bb_Al_A2	-145,01	-72,71	-67,96	-4,35
bb_Al_A3	-144,36	-72,53	-67,96	-3,88
bb_Al_A4	-144,78	-72,75	-67,96	-4,07
bb_Al_I1	-145	-72,49	-67,96	-4,54
bb_Al_I2	-146,79	-72,39	-68,02	-6,38
<b>bb_Al_I3</b>	<b>-147,01</b>	<b>-72,4</b>	<b>-67,93</b>	<b>-6,68</b>
bb_Al_I4	-143,99	-72,7	-67,94	-3,35

Fortsetzung Tabelle C1

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bb_Al_A1	-2,38	0,04	1,58
bb_Al_A2	-2,69	0,07	1,58
bb_Al_A3	-2,04	0,25	1,58
bb_Al_A4	-2,46	0,03	1,58
bb_Al_I1	-2,68	0,29	1,58
bb_Al_I2	-4,47	0,39	1,52
<b>bb_Al_I3</b>	<b>-4,69</b>	<b>0,38</b>	<b>1,61</b>
bb_Al_I4	-1,67	0,08	1,6

Abbildung C2 :



N-Benzoyl-alaninethylester-Isopropanol-Aggregat

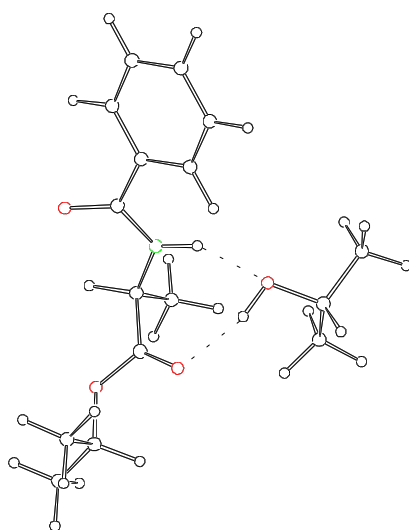
Tabelle C2 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
be_Al_A1	-178,84	-106,88	-67,96	-4
be_Al_A2	-179,19	-106,84	-67,96	-4,4
be_Al_A3	-178,5	-106,65	-67,96	-3,9
be_Al_A4	-178,91	-106,89	-67,96	-4,07
be_Al_I1	-178,37	-106,84	-67,99	-3,54
be_Al_I2	-181,02	-106,53	-68,02	-6,47
<b>be_Al_I3</b>	<b>-181,13</b>	<b>-106,53</b>	<b>-67,89</b>	<b>-6,71</b>
be_Al_I4	-178,46	-106,76	-67,99	-3,71

Fortsetzung Tabelle C2

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
be_Al_A1	-2,39	0,03	1,58
be_Al_A2	-2,74	0,07	1,58
be_Al_A3	-2,05	0,26	1,58
be_Al_A4	-2,46	0,02	1,58
be_Al_I1	-1,92	0,07	1,55
be_Al_I2	-4,57	0,38	1,52
<b>be_Al_I3</b>	<b>-4,68</b>	<b>0,38</b>	<b>1,65</b>
be_Al_I4	-2,01	0,15	1,55

Abbildung C3 :



N-Benzoyl-alaninisopropylester-Isopropanol-Aggregat

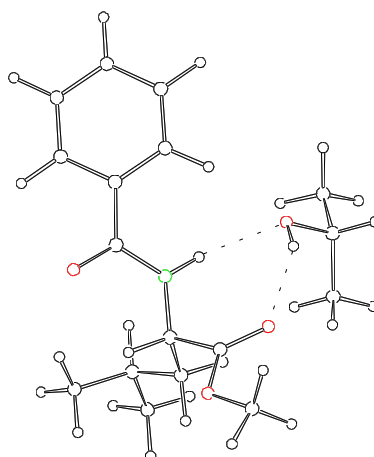
Tabelle C3 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bi_Al_A1	-182,81	-110,84	-67,96	-4,01
bi_Al_A2	-183,15	-110,8	-67,96	-4,39
bi_Al_A3	-182,43	-110,62	-67,96	-3,85
bi_Al_A4	-182,88	-110,84	-67,96	-4,07
bi_Al_I1	-182,31	-110,81	-67,99	-3,51
bi_Al_I2	-184,83	-110,44	-67,93	-6,46
<b>bi_Al_I3</b>	<b>-185,1</b>	<b>-110,48</b>	<b>-67,88</b>	<b>-6,74</b>
bi_Al_I4	-182,46	-110,71	-67,99	-3,76

Fortsetzung Tabelle C3

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bi_Al_A1	-2,4	0,03	1,58
bi_Al_A2	-2,74	0,07	1,58
bi_Al_A3	-2,02	0,25	1,58
bi_Al_A4	-2,47	0,03	1,58
bi_Al_I1	-1,9	0,06	1,55
bi_Al_I2	-4,42	0,43	1,61
<b>bi_Al_I3</b>	<b>-4,69</b>	<b>0,39</b>	<b>1,66</b>
bi_Al_I4	-2,05	0,16	1,55

Abbildung C4 :



N-Benzoyl-leucinmethylester-Isopropanol-Aggregat

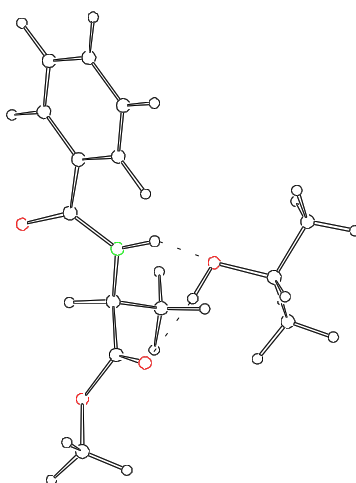
Tabelle C4 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bl_AI_A1	-190,42	-118,33	-67,96	-4,12
bl_AI_A2	-190,58	-118,06	-67,98	-4,55
bl_AI_A3	-190,56	-118,11	-67,98	-4,47
bl_AI_A4	-190,5	-118,32	-67,96	-4,22
bl_AI_I1	-190,14	-118,32	-67,96	-3,86
bl_AI_I2	-192,23	-117,97	-67,92	-6,34
<b>bl_AI_I3</b>	<b>-192,57</b>	<b>-118,01</b>	<b>-67,89</b>	<b>-6,67</b>
bl_AI_I4	-190,1	-118,33	-67,96	-3,81

Fortsetzung Tabelle C4

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bl_AI_A1	-2,51	0,04	1,58
bl_AI_A2	-2,67	0,31	1,56
bl_AI_A3	-2,65	0,26	1,56
bl_AI_A4	-2,59	0,05	1,58
bl_AI_I1	-2,23	0,05	1,58
bl_AI_I2	-4,32	0,4	1,62
<b>bl_AI_I3</b>	<b>-4,66</b>	<b>0,36</b>	<b>1,65</b>
bl_AI_I4	-2,19	0,04	1,58

Abbildung C5 :



N-Benzoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Aggregat

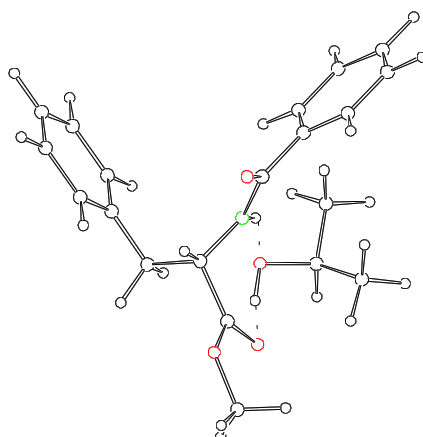
Tabelle C5 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bm_Al_A1	-172,89	-100,94	-67,96	-3,99
bm_Al_A2	-173,24	-100,89	-67,96	-4,39
bm_Al_A3	-172,56	-100,72	-67,95	-3,89
bm_Al_I1	-172,74	-100,92	-67,96	-3,87
bm_Al_I2	-175,1	-100,59	-68,02	-6,49
<b>bm_Al_I3</b>	<b>-175,2</b>	<b>-100,59</b>	<b>-67,91</b>	<b>-6,7</b>
bm_Al_I4	-172,67	-100,92	-67,96	-3,79

Fortsetzung Tabelle C5

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bm_Al_A1	-2,38	0,03	1,58
bm_Al_A2	-2,73	0,08	1,58
bm_Al_A3	-2,05	0,25	1,59
bm_Al_I1	-2,23	0,05	1,58
bm_Al_I2	-4,59	0,38	1,52
<b>bm_Al_I3</b>	<b>-4,69</b>	<b>0,38</b>	<b>1,63</b>
bm_Al_I4	-2,16	0,05	1,58

Abbildung C6 :



N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C6 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Isopropanol-Aggregates

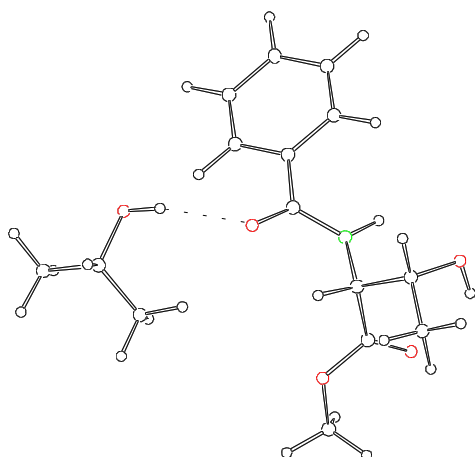
Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bp_Al_A1	-145,52	-73,51	-67,96	-4,05
bp_Al_A2	-146,79	-73,38	-67,98	-5,43
bp_Al_A3	-146,35	-73,41	-67,97	-4,97
bp_Al_A4	-145,42	-73,51	-67,96	-3,96
bp_Al_I1	-145,39	-73,5	-67,96	-3,94
<b>bp_Al_I2</b>	<b>-147,41</b>	<b>-73,24</b>	<b>-67,95</b>	<b>-6,21</b>
bp_Al_I3	-147,39	-73,24	-68	-6,15
bp_Al_I4	-145,3	-73,49	-67,96	-3,84

Fortsetzung Tabelle C6

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bp_Al_A1	-2,44	0,03	1,58
bp_Al_A2	-3,71	0,16	1,56
bp_Al_A3	-3,27	0,13	1,57
bp_Al_A4	-2,34	0,03	1,58
bp_Al_I1	-2,31	0,04	1,58
<b>bp_Al_I2</b>	<b>-4,33</b>	<b>0,3</b>	<b>1,59</b>
bp_Al_I3	-4,31	0,3	1,54
bp_Al_I4	-2,22	0,05	1,58



Abbildung C7 :



N-Benzoyl-threoninemethylester -Isopropanol-Aggregat

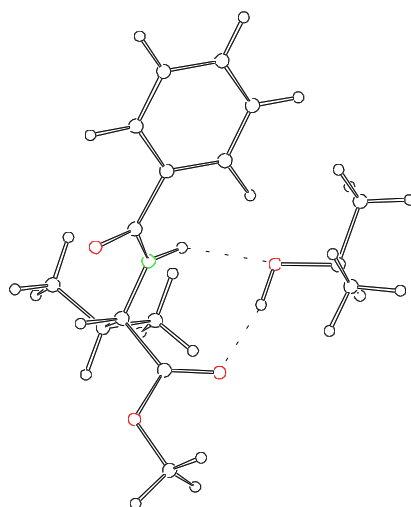
Tabelle C7 : Energien des N-Benzoyl-threoninemethylester -Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bt_Al_A1	-224,67	-152,66	-67,96	-4,05
<b>bt_Al_A2</b>	<b>-225,69</b>	<b>-152,58</b>	<b>-67,94</b>	<b>-5,17</b>
bt_Al_A3	-224,87	-152,52	-67,95	-4,4
bt_Al_A4	-224,61	-152,65	-67,96	-4,01
bt_Al_I1	-224,4	-152,64	-67,96	-3,8
bt_Al_I2	-225,5	-151,77	-67,97	-5,77
bt_Al_I3	-224,53	-152,35	-67,92	-4,26
bt_Al_I4	-224,41	-152,65	-67,95	-3,81

Fortsetzung Tabelle C7

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bt_Al_A1	-2,44	0,03	1,58
<b>bt_Al_A2</b>	<b>-3,46</b>	<b>0,11</b>	<b>1,6</b>
bt_Al_A3	-2,64	0,17	1,59
bt_Al_A4	-2,38	0,04	1,58
bt_Al_I1	-2,17	0,05	1,58
bt_Al_I2	-3,27	0,92	1,57
bt_Al_I3	-2,3	0,34	1,62
bt_Al_I4	-2,18	0,04	1,59

Abbildung C8 :



N-Benzoyl-valinmethylester-Isopropanol-Aggregat

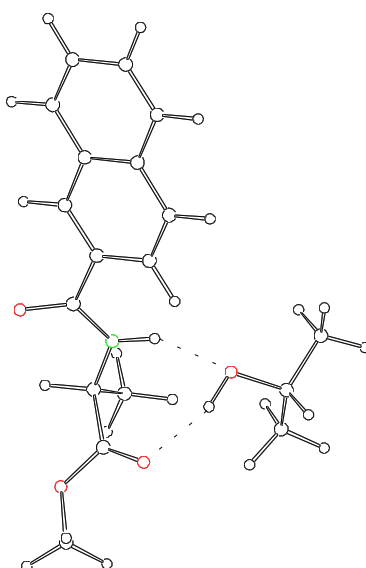
Tabelle C8 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
bv_Al_A1	-183,62	-111,64	-67,96	-4,02
bv_Al_A2	-184,63	-111,6	-67,97	-5,06
bv_Al_A3	-183,98	-111,6	-67,99	-4,39
bv_Al_A4	-183,83	-111,59	-67,97	-4,27
bv_Al_I1	-183,46	-111,62	-67,96	-3,89
<b>bv_Al_I2</b>	<b>-185,95</b>	<b>-111,12</b>	<b>-67,94</b>	<b>-6,88</b>
bv_Al_I3	-185,92	-111,33	-68	-6,58
bv_Al_I4	-183,47	-111,64	-67,97	-3,86

Fortsetzung Tabelle C8

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
bv_Al_A1	-2,41	0,03	1,58
bv_Al_A2	-3,42	0,07	1,57
bv_Al_A3	-2,77	0,07	1,55
bv_Al_A4	-2,62	0,08	1,57
bv_Al_I1	-2,25	0,05	1,58
<b>bv_Al_I2</b>	<b>-4,74</b>	<b>0,55</b>	<b>1,6</b>
bv_Al_I3	-4,71	0,34	1,54
bv_Al_I4	-2,26	0,03	1,57

Abbildung C9 :



N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Aggregat

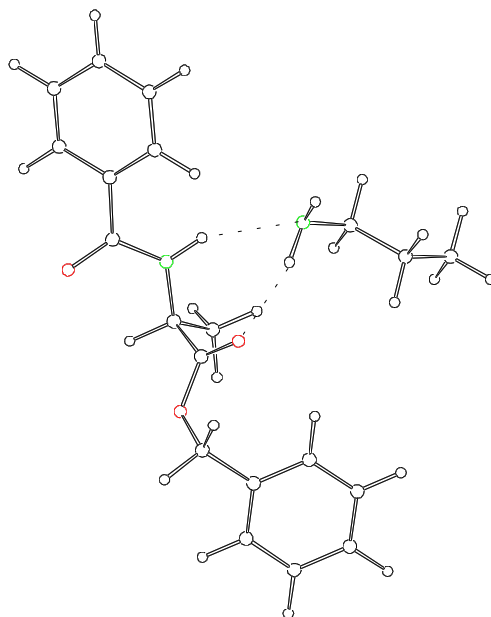
Tabelle C9 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Al	Gesamt
cn_Al_A1	-154,39	-82,26	-67,95	-4,17
cn_Al_A2	-154,57	-82,22	-67,96	-4,4
cn_Al_A3	-153,88	-82,04	-67,95	-3,88
cn_Al_A4	-154,45	-82,27	-67,95	-4,23
cn_Al_I1	-154,08	-82,24	-67,96	-3,88
cn_Al_I2	-156,37	-81,89	-68,02	-6,46
<b>cn_Al_I3</b>	<b>-156,46</b>	<b>-81,9</b>	<b>-67,9</b>	<b>-6,65</b>
cn_Al_I4	-154	-82,25	-67,96	-3,79

Fortsetzung Tabelle C9

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Al
cn_Al_A1	-2,56	0,03	1,59
cn_Al_A2	-2,74	0,07	1,58
cn_Al_A3	-2,05	0,25	1,59
cn_Al_A4	-2,62	0,02	1,59
cn_Al_I1	-2,25	0,05	1,58
cn_Al_I2	-4,54	0,4	1,52
<b>cn_Al_I3</b>	<b>-4,63</b>	<b>0,39</b>	<b>1,64</b>
cn_Al_I4	-2,17	0,04	1,58

Abbildung C10 :



N-Benzoyl-alaninbenzylester-Propylamin-Aggregat

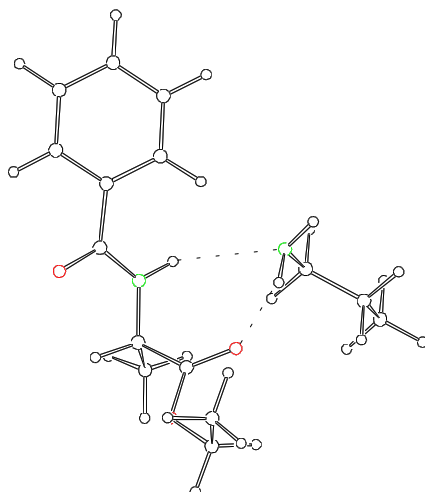
Tabelle C10 : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
bb_Pa_A3	-97,96	-72,73	-22,02	-3,21
bb_Pa_A2	-97,96	-72,76	-22,05	-3,14
bb_Pa_A1	-98,17	-72,76	-22,05	-3,36
<b>bb_Pa_I3</b>	<b>-98,34</b>	<b>-72,47</b>	<b>-22,08</b>	<b>-3,8</b>
bb_Pa_I4	-97,39	-72,73	-21,96	-2,7
bb_Pa_I1	-98,04	-72,5	-21,95	-3,59
bb_Pa_I2	-97,9	-72,62	-22	-3,27
bb_Pa_A3/6	-98,26	-72,46	-22,02	-3,77

Fortsetzung Tabelle C10

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
bb_Pa_A3	-3,1	0,05	0,06
bb_Pa_A2	-3,1	0,02	0,03
bb_Pa_A1	-3,31	0,02	0,03
<b>bb_Pa_I3</b>	<b>-3,48</b>	<b>0,31</b>	<b>0</b>
bb_Pa_I4	-2,53	0,05	0,12
bb_Pa_I1	-3,18	0,28	0,13
bb_Pa_I2	-3,04	0,16	0,08
bb_Pa_A3/6	-3,4	0,32	0,06

Abbildung C11 :



N-Benzoyl-alaninethylester-Propylamin-Aggregat

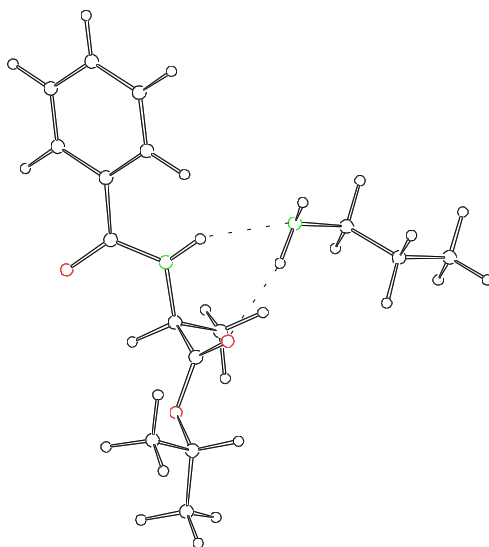
Tabelle C11 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
be_Pa_A4	-132,31	-106,9	-22,05	-3,36
be_Pa_A3	-132,24	-106,89	-21,97	-3,38
be_Pa_A2	-132,11	-106,9	-22,05	-3,16
<b>be_Pa_I3</b>	<b>-132,55</b>	<b>-106,61</b>	<b>-22,08</b>	<b>-3,87</b>
be_Pa_I4	-131,59	-106,9	-22,05	-2,64
be_Pa_I1	-131,89	-106,88	-22,02	-2,98
be_Pa_I2	-132,14	-106,78	-22	-3,36
be_Pa_A3/6	-132,43	-106,66	-22,02	-3,75

Fortsetzung Tabelle C11

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
be_Pa_A4	-3,32	0,01	0,03
be_Pa_A3	-3,25	0,02	0,11
be_Pa_A2	-3,12	0,01	0,03
<b>be_Pa_I3</b>	<b>-3,56</b>	<b>0,3</b>	<b>0</b>
be_Pa_I4	-2,6	0,01	0,03
be_Pa_I1	-2,9	0,03	0,06
be_Pa_I2	-3,15	0,13	0,08
be_Pa_A3/6	-3,44	0,25	0,06

Abbildung C12 :



N-Benzoyl-alaninisopropylester-Propylamin-Aggregat

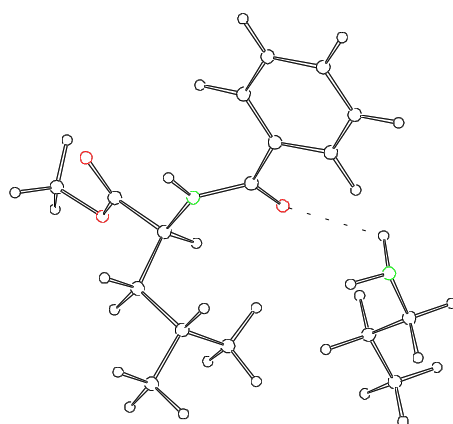
Tabelle C12 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
bi_Pa_A3	-136,31	-110,85	-21,98	-3,49
bi_Pa_A2	-136,08	-110,86	-22,05	-3,17
bi_Pa_A1	-136,28	-110,86	-22,05	-3,36
<b>bi_Pa_I3</b>	<b>-136,51</b>	<b>-110,56</b>	<b>-22,08</b>	<b>-3,87</b>
bi_Pa_I4	-135,59	-110,85	-22,04	-2,7
bi_Pa_I1	-136,1	-110,83	-21,99	-3,29
bi_Pa_I2	-136,12	-110,74	-22	-3,38
bi_Pa_A3/6	-136,49	-110,49	-22,04	-3,96

Fortsetzung Tabelle C12

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
bi_Pa_A3	-3,36	0,02	0,1
bi_Pa_A2	-3,13	0,01	0,03
bi_Pa_A1	-3,33	0,01	0,03
<b>bi_Pa_I3</b>	<b>-3,56</b>	<b>0,31</b>	<b>0</b>
bi_Pa_I4	-2,64	0,02	0,04
bi_Pa_I1	-3,15	0,04	0,09
bi_Pa_I2	-3,17	0,13	0,08
bi_Pa_A3/6	-3,54	0,38	0,04

Abbildung C13 :



N-Benzoyl-leucinmethylester-Propylamin-Aggregat

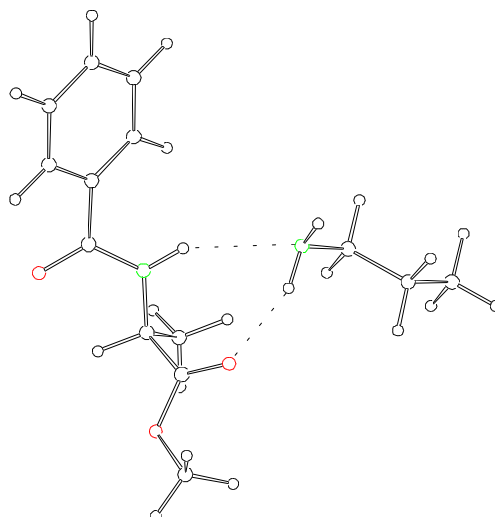
Tabelle C13 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
<b>bl_Pa_A4</b>	<b>-143,97</b>	<b>-118,36</b>	<b>-22,04</b>	<b>-3,58</b>
bl_Pa_A3	-143,64	-118,11	-22,03	-3,5
bl_Pa_A2	-143,5	-118,33	-22,05	-3,12
bl_Pa_A1	-143,87	-118,36	-22,05	-3,46
bl_Pa_I3	-143,95	-118,11	-22,08	-3,76
bl_Pa_I4	-143,17	-118,36	-22,05	-2,75
bl_Pa_I1	-143,18	-118,36	-22,05	-2,76
bl_Pa_I2	-143,56	-118,24	-22	-3,32
bl_Pa_A3/6	-143,48	-118,36	-22,05	-3,08

Fortsetzung Tabelle C13

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
<b>bl_Pa_A4</b>	<b>-3,51</b>	<b>0,02</b>	<b>0,04</b>
bl_Pa_A3	-3,18	0,27	0,05
bl_Pa_A2	-3,04	0,05	0,03
bl_Pa_A1	-3,41	0,02	0,03
bl_Pa_I3	-3,49	0,27	0
bl_Pa_I4	-2,71	0,02	0,03
bl_Pa_I1	-2,72	0,02	0,03
bl_Pa_I2	-3,1	0,14	0,08
bl_Pa_A3/6	-3,02	0,02	0,03

Abbildung C14 :



N-Benzoyl-alaninmethylester-Propylamin-Aggregat

Tabelle C14 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylester-Propylamin-Aggregates

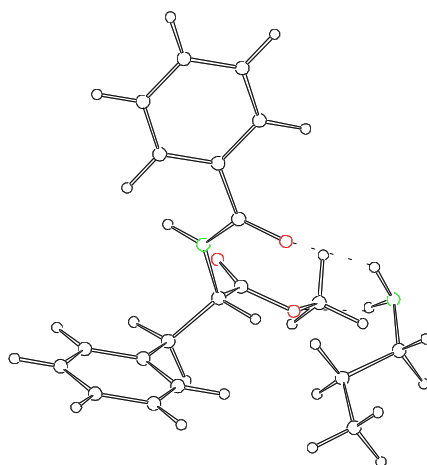
Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
<b>bm_Pa_I3</b>	<b>-126,43</b>	<b>-100,53</b>	<b>-22,08</b>	<b>-3,83</b>
bm_Pa_I4	-125,60	-100,74	-22,05	-2,81
bm_Pa_I1	-125,62	-100,74	-22,05	-2,83
bm_Pa_I2	-126,07	-100,51	-21,98	-3,58
bm_Pa_A4	-125,88	-100,73	-21,93	-3,22
bm_Pa_A3	-126,00	-100,68	-22,02	-3,30
bm_Pa_A2	-125,89	-100,66	-22,05	-3,18
bm_Pa_A1	-126,11	-100,74	-22,05	-3,32
bm_Pa_A2/7	-125,87	-100,20	-22,03	-3,64
bm_Pa_A3/6	-126,15	-100,46	-22,03	-3,66

Fortsetzung Tabelle C14

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
<b>bm_Pa_I3</b>	<b>-3,38</b>	<b>0,44</b>	<b>0,00</b>
bm_Pa_I4	-2,55	0,23	0,03
bm_Pa_I1	-2,57	0,23	0,03
bm_Pa_I2	-3,02	0,46	0,10
bm_Pa_A4	-2,83	0,24	0,15
bm_Pa_A3	-2,95	0,29	0,06
bm_Pa_A2	-2,84	0,31	0,03
bm_Pa_A1	-3,06	0,23	0,03
bm_Pa_A2/7	-2,82	0,77	0,05
bm_Pa_A3/6	-3,10	0,51	0,05



Abbildung C15 :



N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Propylamin-Aggregat

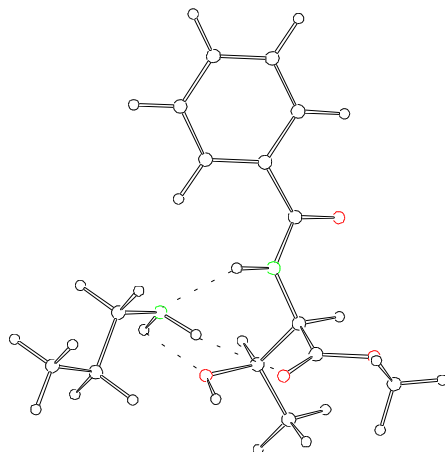
Tabelle C15 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
bp_Pa_A4	-98,94	-73,53	-22,05	-3,36
bp_Pa_A3	-99,36	-73,48	-22,01	-3,86
bp_Pa_A2	-99,26	-73,51	-22,05	-3,69
bp_Pa_I3	-99,38	-73,33	-22,08	-3,97
bp_Pa_I4	-98,4	-73,53	-22,05	-2,82
bp_Pa_I1	-98,42	-73,53	-22,05	-2,84
bp_Pa_I2	-99,01	-73,35	-22	-3,66
<b>bp_Pa_A2/7</b>	<b>-99,42</b>	<b>-73,21</b>	<b>-22,02</b>	<b>-4,19</b>
bp_Pa_A3/6	-98,98	-73,08	-22,02	-3,89

Fortsetzung Tabelle C15

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
bp_Pa_A4	-3,32	0,01	0,03
bp_Pa_A3	-3,74	0,06	0,07
bp_Pa_A2	-3,64	0,03	0,03
bp_Pa_I3	-3,76	0,21	0
bp_Pa_I4	-2,78	0,01	0,03
bp_Pa_I1	-2,8	0,01	0,03
bp_Pa_I2	-3,39	0,19	0,08
<b>bp_Pa_A2/7</b>	<b>-3,8</b>	<b>0,33</b>	<b>0,06</b>
bp_Pa_A3/6	-3,36	0,46	0,06

Abbildung C16 :



N-Benzoyl-threoninmethylester -Propylamin-Aggregat

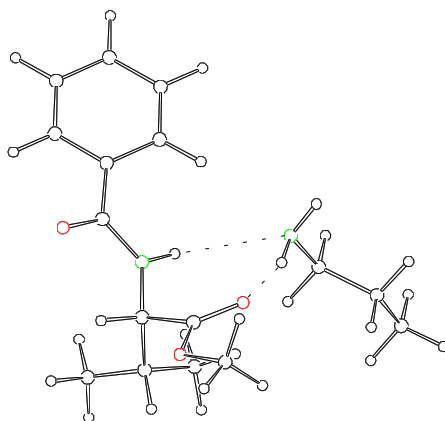
Tabelle C16 : Energien des N-Benzoyl-threoninmethylester -Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
bt_Pa_A4	-178,1	-152,67	-22,05	-3,38
bt_Pa_A3	-178,23	-152,66	-22,02	-3,55
bt_Pa_A2	-178,3	-152,66	-22,05	-3,59
bt_Pa_I3	-178,33	-152,55	-22,07	-3,71
bt_Pa_I4	-177,6	-152,67	-22,04	-2,89
bt_Pa_I1	-177,43	-152,67	-22,05	-2,71
<b>bt_Pa_I2</b>	<b>-178,72</b>	<b>-152,23</b>	<b>-22,08</b>	<b>-4,41</b>
bt_Pa_A2/7	-178,69	-152,57	-22,01	-4,11
bt_Pa_A3/6	-178,49	-152,48	-22	-4,01

Fortsetzung Tabelle C16

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
bt_Pa_A4	-3,33	0,02	0,03
bt_Pa_A3	-3,46	0,03	0,06
bt_Pa_A2	-3,53	0,03	0,03
bt_Pa_I3	-3,56	0,14	0,01
bt_Pa_I4	-2,83	0,02	0,04
bt_Pa_I1	-2,66	0,02	0,03
<b>bt_Pa_I2</b>	<b>-3,95</b>	<b>0,46</b>	<b>0</b>
bt_Pa_A2/7	-3,92	0,12	0,07
bt_Pa_A3/6	-3,72	0,21	0,08

Abbildung C17 :



N-Benzoyl-valinmethylester-Propylamin-Aggregat

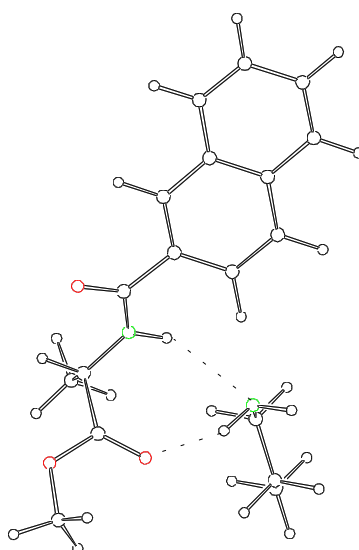
Tabelle C17 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
bv_Pa_A4	-136,9	-111,64	-21,94	-3,32
bv_Pa_A3	-137,04	-111,62	-22,02	-3,4
bv_Pa_A2	-137,05	-111,64	-22,05	-3,35
bv_Pa_A1	-137,09	-111,66	-22,05	-3,37
<b>bv_Pa_I3</b>	<b>-137,49</b>	<b>-111,47</b>	<b>-22,08</b>	<b>-3,94</b>
bv_Pa_I4	-136,63	-111,66	-22,06	-2,91
bv_Pa_I1	-136,48	-111,66	-22,05	-2,77
bv_Pa_I2	-136,74	-111,64	-22	-3,1
bv_Pa_A2/7	-137,19	-111,44	-22,03	-3,72
bv_Pa_A3/6	-136,83	-111,17	-22,03	-3,62

Fortsetzung Tabelle C17

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
bv_Pa_A4	-3,15	0,03	0,14
bv_Pa_A3	-3,29	0,05	0,06
bv_Pa_A2	-3,3	0,03	0,03
bv_Pa_A1	-3,34	0,01	0,03
<b>bv_Pa_I3</b>	<b>-3,74</b>	<b>0,2</b>	<b>0</b>
bv_Pa_I4	-2,88	0,01	0,02
bv_Pa_I1	-2,73	0,01	0,03
bv_Pa_I2	-2,99	0,03	0,08
bv_Pa_A2/7	-3,44	0,23	0,05
bv_Pa_A3/6	-3,08	0,5	0,05

Abbildung C18 :



N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Propylamin-Aggregat

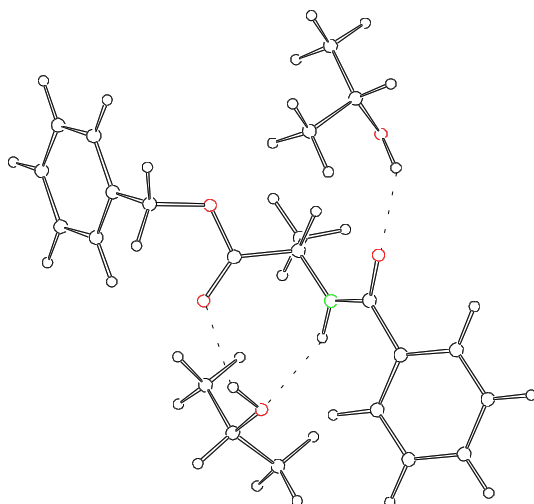
Tabelle C18 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H /(kcal/mol)			W <sub>A</sub> /(kcal/mol)
	Gesamt	As	Pa	Gesamt
cn_Pa_A4	-107,3	-82,27	-21,96	-3,08
cn_Pa_A3	-107,55	-82,22	-22,02	-3,32
cn_Pa_A2	-107,5	-82,28	-22,05	-3,17
cn_Pa_A1	-107,82	-82,28	-22,05	-3,48
<b>cn_Pa_I3</b>	<b>-107,91</b>	<b>-81,98</b>	<b>-22,08</b>	<b>-3,85</b>
cn_Pa_I4	-107,08	-82,28	-22,05	-2,75
cn_Pa_I1	-107,1	-82,28	-22,05	-2,77
cn_Pa_I2	-107,51	-82,16	-22	-3,35
cn_Pa_A3/6	-107,59	-81,98	-22,03	-3,58

Fortsetzung Tabelle C18

Substruktur	W <sub>M</sub> /(kcal/mol)		
	Gesamt	As	Pa
cn_Pa_A4	-2,92	0,03	0,12
cn_Pa_A3	-3,17	0,08	0,06
cn_Pa_A2	-3,12	0,02	0,03
cn_Pa_A1	-3,44	0,02	0,03
<b>cn_Pa_I3</b>	<b>-3,53</b>	<b>0,32</b>	<b>0</b>
cn_Pa_I4	-2,7	0,02	0,03
cn_Pa_I1	-2,72	0,02	0,03
cn_Pa_I2	-3,13	0,14	0,08
cn_Pa_A3/6	-3,21	0,32	0,05

Abbildung C19 :

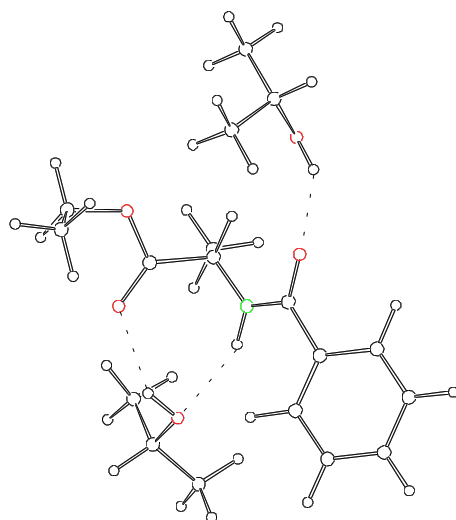


N-Benzoyl-alaninbenzylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C19 : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12
A1_I1	-216,9	-144,41	-144,96	-135,9	-72,46	-67,96	-67,96	-8,52	-4	-4,55	0,02	-5,04	-2,09	-2,64	3,18	0,32	1,58	1,58
A1_I2	-218,76	-144,32	-146,76	-135,98	-72,34	-67,97	-68,02	-10,43	-4,01	-6,4	0,01	-6,9	-2	-4,44	3,1	0,44	1,57	1,52
A1_I3	-218,96	-144,34	-146,98	-135,89	-72,36	-67,97	-67,93	-10,7	-4,01	-6,69	0,01	-7,1	-2,02	-4,66	3,19	0,42	1,57	1,61
A1_I4	-215,93	-144,63	-143,96	-135,92	-72,66	-67,96	-67,94	-7,36	-4,01	-3,35	-0,02	-4,07	-2,31	-1,64	3,16	0,12	1,58	1,6
A2_I1	-217,33	-144,85	-144,82	-135,9	-72,32	-67,95	-67,96	-9,1	-4,58	-4,54	0,01	-5,47	-2,53	-2,5	3,18	0,46	1,59	1,58
A2_I2	-219,12	-144,67	-146,74	-135,95	-72,33	-67,97	-68,02	-10,8	-4,37	-6,39	0,04	-7,26	-2,35	-4,42	3,13	0,45	1,57	1,52
<b>A2_I3</b>	<b>-219,38</b>	<b>-144,68</b>	<b>-146,96</b>	<b>-135,9</b>	<b>-72,36</b>	<b>-67,96</b>	<b>-67,92</b>	<b>-11,14</b>	<b>-4,36</b>	<b>-6,68</b>	<b>-0,01</b>	<b>-7,52</b>	<b>-2,36</b>	<b>-4,64</b>	<b>3,18</b>	<b>0,42</b>	<b>1,58</b>	<b>1,62</b>
A2_I4	-216,27	-144,94	-143,91	-135,95	-72,63	-67,95	-67,95	-7,75	-4,36	-3,34	-0,05	-4,41	-2,62	-1,59	3,13	0,15	1,59	1,59
A3_I1	-216,59	-144,07	-144,73	-135,95	-72,24	-67,95	-67,96	-8,44	-3,88	-4,52	-0,03	-4,73	-1,75	-2,41	3,13	0,54	1,59	1,58
A3_I2	-218,45	-143,9	-146,75	-135,99	-72,31	-67,96	-68,02	-10,17	-3,64	-6,42	-0,01	-6,59	-1,58	-4,43	3,09	0,47	1,58	1,52
A3_I3	-218,7	-143,91	-146,96	-135,94	-72,34	-67,96	-67,93	-10,47	-3,61	-6,69	-0,06	-6,84	-1,59	-4,64	3,14	0,44	1,58	1,61
A3_I4	-216,22	-144,07	-144,44	-135,9	-72,27	-67,96	-67,98	-8,01	-3,84	-4,19	0,04	-4,36	-1,75	-2,12	3,18	0,51	1,58	1,56
A4_I1	-216,97	-144,48	-144,96	-135,9	-72,46	-67,96	-67,96	-8,6	-4,07	-4,55	0,01	-5,11	-2,16	-2,64	3,18	0,32	1,58	1,58
A4_I2	-218,83	-144,39	-146,76	-136	-72,35	-67,96	-68,02	-10,49	-4,07	-6,38	-0,02	-6,97	-2,07	-4,44	3,08	0,43	1,58	1,52
A4_I3	-219,01	-144,41	-146,98	-135,87	-72,38	-67,96	-67,93	-10,73	-4,07	-6,67	0,02	-7,15	-2,09	-4,66	3,21	0,4	1,58	1,61

Abbildung C20 :

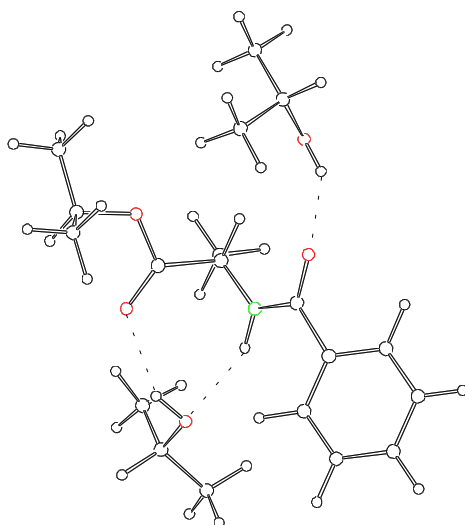


N-Benzoyl-alaninethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C20 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-250,28	-178,77	-178,34	-135,93	-106,81	-67,96	-67,99	-7,52	-4	-3,55	0,01	-4,29	-2,32	-1,89	3,15	0,1	1,58	1,55	
A1_I2	-252,99	-178,46	-180,99	-135,98	-106,48	-67,97	-68,02	-10,52	-4,01	-6,49	0,01	-7	-2,01	-4,54	3,1	0,43	1,57	1,52	
A1_I3	-253,09	-178,46	-181,1	-135,85	-106,48	-67,97	-67,89	-10,75	-4,01	-6,73	0,01	-7,1	-2,01	-4,65	3,23	0,43	1,57	1,65	
A1_I4	-250,38	-178,69	-178,42	-135,95	-106,73	-67,96	-67,98	-7,7	-4	-3,71	-0,01	-4,39	-2,24	-1,97	3,13	0,18	1,58	1,56	
A2_I1	-250,67	-179,12	-178,3	-135,94	-106,74	-67,95	-67,98	-7,99	-4,42	-3,57	0	-4,68	-2,67	-1,85	3,14	0,17	1,59	1,56	
A2_I2	-253,39	-178,85	-180,96	-135,96	-106,46	-67,98	-68,02	-10,94	-4,42	-6,48	0,04	-7,4	-2,4	-4,51	3,12	0,45	1,56	1,52	
A2_I3	-253,54	-178,82	-181,07	-135,87	-106,47	-67,97	-67,87	-11,23	-4,38	-6,73	-0,03	-7,55	-2,37	-4,62	3,21	0,44	1,57	1,67	
A2_I4	-250,75	-179,16	-178,34	-135,99	-106,79	-67,95	-67,98	-8,02	-4,41	-3,56	-0,05	-4,76	-2,71	-1,89	3,09	0,12	1,59	1,56	
A3_I1	-249,98	-178,42	-178,08	-135,96	-106,55	-67,95	-67,99	-7,49	-3,92	-3,54	-0,02	-3,99	-1,97	-1,63	3,12	0,36	1,59	1,55	
A3_I2	-252,48	-177,99	-180,85	-136,07	-106,53	-67,98	-68,02	-9,96	-3,49	-6,3	-0,07	-6,49	-1,54	-4,4	3,01	0,38	1,56	1,52	
A3_I3	-252,85	-178,04	-181,08	-135,9	-106,44	-67,96	-67,87	-10,58	-3,65	-6,77	-0,07	-6,86	-1,59	-4,63	3,18	0,47	1,58	1,67	
A3_I4	-250,01	-178,36	-178,19	-135,92	-106,52	-67,95	-67,99	-7,55	-3,89	-3,68	0,02	-4,02	-1,91	-1,74	3,16	0,39	1,59	1,55	
A4_I1	-250,35	-178,84	-178,35	-135,94	-106,81	-67,96	-67,99	-7,6	-4,07	-3,55	0	-4,36	-2,39	-1,9	3,14	0,1	1,58	1,55	
A4_I2	-253,06	-178,53	-180,98	-136	-106,49	-67,96	-68,02	-10,58	-4,07	-6,47	-0,02	-7,07	-2,08	-4,53	3,08	0,42	1,58	1,52	
A4_I3	-253,12	-178,53	-181,09	-135,85	-106,5	-67,96	-67,89	-10,77	-4,07	-6,7	0,01	-7,13	-2,08	-4,64	3,23	0,41	1,58	1,65	
A4_I4	-250,44	-178,76	-178,43	-135,94	-106,73	-67,96	-67,98	-7,76	-4,07	-3,71	0	-4,45	-2,31	-1,98	3,14	0,18	1,58	1,56	

Abbildung C21 :

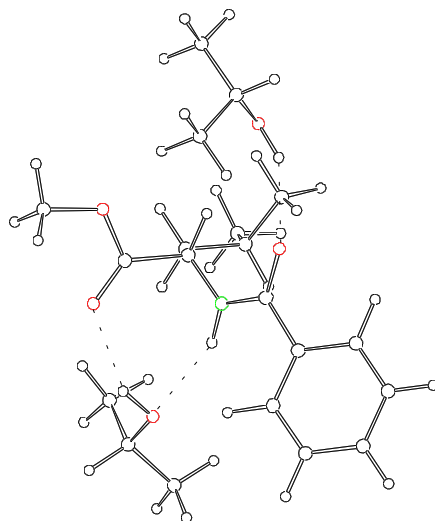


N-Benzoyl-alaninisopropylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C21 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-254,22	-182,74	-182,28	-135,94	-110,77	-67,96	-67,99	-7,5	-4,01	-3,52	0,01	-4,27	-2,33	-1,87	3,14	0,1	1,58	1,55	
A1_I2	-256,77	-182,37	-184,79	-135,87	-110,37	-67,97	-67,93	-10,5	-4,03	-6,49	0,03	-6,82	-1,96	-4,38	3,21	0,5	1,57	1,61	
A1_I3	-257,06	-182,42	-185,07	-135,84	-110,43	-67,97	-67,88	-10,78	-4,02	-6,76	0,01	-7,11	-2,01	-4,66	3,24	0,44	1,57	1,66	
A1_I4	-254,38	-182,65	-182,42	-135,96	-110,68	-67,96	-67,99	-7,76	-4,01	-3,76	-0,01	-4,43	-2,24	-2,01	3,12	0,19	1,58	1,55	
A2_I1	-254,6	-183,07	-182,23	-135,94	-110,71	-67,95	-67,99	-7,95	-4,41	-3,53	0	-4,65	-2,66	-1,82	3,14	0,16	1,59	1,55	
A2_I2	-257,26	-182,72	-184,73	-135,85	-110,27	-67,96	-67,89	-11,13	-4,49	-6,57	0	-7,31	-2,31	-4,32	3,23	0,6	1,58	1,65	
A2_I3	-257,55	-182,79	-185,02	-135,86	-110,38	-67,96	-67,86	-11,34	-4,45	-6,78	-0,04	-7,6	-2,38	-4,61	3,22	0,49	1,58	1,68	
A2_I4	-254,74	-182,95	-182,36	-135,99	-110,61	-67,95	-67,99	-8,19	-4,39	-3,76	-0,05	-4,79	-2,54	-1,95	3,09	0,26	1,59	1,55	
A3_I1	-253,88	-182,35	-182,02	-135,97	-110,52	-67,95	-67,99	-7,41	-3,88	-3,51	-0,02	-3,93	-1,94	-1,61	3,11	0,35	1,59	1,55	
A3_I2	-256,54	-181,96	-184,77	-135,91	-110,33	-67,96	-67,92	-10,33	-3,68	-6,52	-0,03	-6,59	-1,55	-4,36	3,17	0,54	1,58	1,62	
A3_I3	-256,83	-182	-185,05	-135,9	-110,39	-67,96	-67,87	-10,61	-3,65	-6,79	-0,07	-6,88	-1,59	-4,64	3,18	0,48	1,58	1,67	
A3_I4	-253,98	-182,27	-182,2	-135,93	-110,47	-67,96	-67,99	-7,56	-3,84	-3,74	0,02	-4,03	-1,86	-1,79	3,15	0,4	1,58	1,55	
A4_I1	-254,29	-182,81	-182,28	-135,95	-110,77	-67,96	-67,99	-7,57	-4,08	-3,52	0	-4,34	-2,4	-1,87	3,13	0,1	1,58	1,55	
A4_I2	-257,02	-182,48	-184,94	-136	-110,44	-67,96	-68,02	-10,59	-4,08	-6,48	-0,02	-7,07	-2,07	-4,53	3,08	0,43	1,58	1,52	
A4_I3	-257,1	-182,49	-185,06	-135,84	-110,45	-67,96	-67,88	-10,8	-4,08	-6,73	0,01	-7,15	-2,08	-4,65	3,24	0,42	1,58	1,66	
A4_I4	-254,44	-182,72	-182,43	-135,94	-110,68	-67,96	-67,99	-7,82	-4,08	-3,76	0	-4,49	-2,31	-2,02	3,14	0,19	1,58	1,55	

Abbildung C22 :



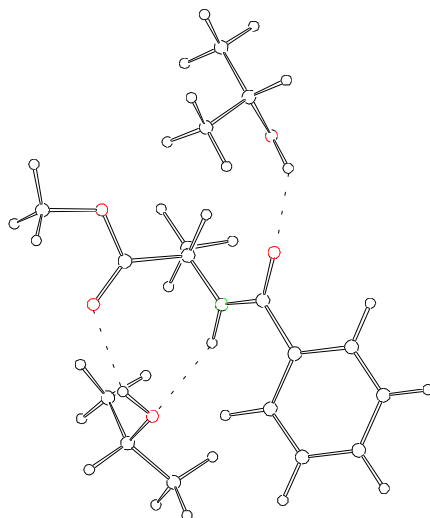
N-Benzoyl-leucinmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C22 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-262,17	-190,36	-190,09	-135,91	-118,27	-67,96	-67,95	-7,98	-4,13	-3,87	0,01	-4,71	-2,44	-2,17	3,17	0,11	1,58	1,59	
A1_I2	-264,25	-190,04	-192,19	-135,83	-117,95	-67,95	-67,92	-10,43	-4,14	-6,32	0,04	-6,79	-2,12	-4,27	3,25	0,43	1,59	1,62	
A1_I3	-264,64	-190,09	-192,52	-135,84	-117,99	-67,96	-67,89	-10,81	-4,15	-6,65	0	-7,18	-2,17	-4,6	3,24	0,39	1,58	1,65	
A1_I4	-262,14	-190,37	-190,05	-135,94	-118,28	-67,96	-67,96	-7,93	-4,13	-3,81	-0,02	-4,68	-2,45	-2,13	3,14	0,1	1,58	1,58	
A2_I1	-262,35	-190,53	-189,83	-135,91	-117,99	-67,98	-67,96	-8,42	-4,56	-3,88	0,02	-4,89	-2,61	-1,91	3,17	0,39	1,56	1,58	
A2_I2	-264,64	-190,23	-191,95	-135,92	-117,61	-67,99	-67,92	-11,12	-4,63	-6,42	-0,01	-7,18	-2,31	-4,03	3,16	0,77	1,55	1,62	
A2_I3	-265,01	-190,26	-192,28	-135,91	-117,66	-67,99	-67,87	-11,49	-4,62	-6,75	-0,05	-7,55	-2,34	-4,36	3,17	0,72	1,55	1,67	
A2_I4	-262,33	-190,53	-189,77	-135,98	-118	-67,98	-67,96	-8,39	-4,55	-3,81	-0,04	-4,87	-2,61	-1,85	3,1	0,38	1,56	1,58	
A3_I1	-262,33	-190,51	-189,89	-135,89	-118,03	-67,97	-67,96	-8,37	-4,5	-3,9	0,04	-4,87	-2,59	-1,97	3,19	0,35	1,57	1,58	
A3_I2	-264,73	-190,14	-192,14	-135,97	-117,7	-67,98	-67,93	-11,11	-4,46	-6,51	-0,05	-7,27	-2,22	-4,22	3,11	0,68	1,56	1,61	
A3_I3	-264,98	-190,15	-192,36	-135,92	-117,71	-67,98	-67,86	-11,43	-4,46	-6,79	-0,08	-7,52	-2,23	-4,44	3,16	0,67	1,56	1,68	
A3_I4	-262,25	-190,51	-189,82	-135,92	-118,07	-67,97	-67,96	-8,25	-4,47	-3,79	0,02	-4,79	-2,59	-1,9	3,16	0,31	1,57	1,58	
A4_I1	-262,26	-190,45	-190,08	-135,92	-118,26	-67,96	-67,95	-8,09	-4,23	-3,87	0	-4,8	-2,53	-2,16	3,16	0,12	1,58	1,59	
A4_I2	-264,64	-190,09	-192,29	-136	-117,76	-67,97	-68,02	-10,89	-4,36	-6,51	-0,01	-7,18	-2,17	-4,37	3,08	0,62	1,57	1,52	
A4_I3	-264,7	-190,09	-192,39	-135,83	-117,77	-67,97	-67,88	-11,08	-4,35	-6,74	0,02	-7,24	-2,17	-4,47	3,25	0,61	1,57	1,66	
A4_I4	-262,21	-190,45	-190,03	-135,93	-118,27	-67,96	-67,96	-8,03	-4,22	-3,81	-0,01	-4,75	-2,53	-2,11	3,15	0,11	1,58	1,58	



Abbildung C23 :

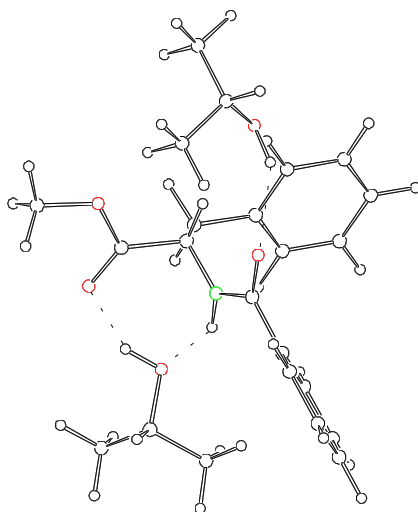


N-Benzoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C23 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-244,64	-172,83	-172,71	-135,9	-100,88	-67,96	-67,95	-7,85	-3,99	-3,87	0,01	-4,59	-2,32	-2,2	3,18	0,09	1,58	1,59	
A1_I2	-247,07	-172,52	-175,07	-135,98	-100,54	-67,97	-68,02	-10,53	-4,01	-6,51	0,01	-7,02	-2,01	-4,56	3,1	0,43	1,57	1,52	
A1_I3	-247,15	-172,51	-175,16	-135,86	-100,54	-67,97	-67,9	-10,73	-4	-6,72	0,01	-7,1	-2	-4,65	3,22	0,43	1,57	1,64	
A1_I4	-244,59	-172,84	-172,64	-135,93	-100,89	-67,96	-67,96	-7,78	-3,99	-3,8	-0,01	-4,54	-2,33	-2,13	3,15	0,08	1,58	1,58	
A2_I1	-245,01	-173,18	-172,66	-135,9	-100,83	-67,95	-67,96	-8,27	-4,4	-3,87	0,01	-4,96	-2,67	-2,15	3,18	0,14	1,59	1,58	
A2_I2	-247,46	-172,91	-175,04	-135,95	-100,52	-67,97	-68,02	-10,96	-4,42	-6,5	0,04	-7,41	-2,4	-4,53	3,13	0,45	1,57	1,52	
A2_I3	-247,64	-172,9	-175,13	-135,87	-100,52	-67,97	-67,87	-11,28	-4,42	-6,74	-0,03	-7,59	-2,39	-4,62	3,21	0,45	1,57	1,67	
A2_I4	-244,98	-173,19	-172,59	-135,96	-100,84	-67,95	-67,96	-8,23	-4,4	-3,79	-0,05	-4,93	-2,68	-2,08	3,12	0,13	1,59	1,58	
A3_I1	-244,35	-172,5	-172,46	-135,93	-100,64	-67,95	-67,96	-7,81	-3,92	-3,86	-0,02	-4,3	-1,99	-1,95	3,15	0,33	1,59	1,58	
A3_I2	-246,79	-172,14	-175,05	-135,99	-100,5	-67,95	-68,02	-10,31	-3,68	-6,53	-0,01	-6,74	-1,63	-4,54	3,09	0,47	1,59	1,52	
A3_I3	-246,93	-172,11	-175,14	-135,89	-100,5	-67,95	-67,88	-10,59	-3,66	-6,76	-0,06	-6,88	-1,6	-4,63	3,19	0,47	1,59	1,66	
A3_I4	-244,24	-172,51	-172,4	-135,87	-100,66	-67,95	-67,96	-7,66	-3,9	-3,78	0,04	-4,19	-2	-1,89	3,21	0,31	1,59	1,58	
A4_I1	-244,71	-172,9	-172,72	-135,91	-100,88	-67,96	-67,95	-7,92	-4,06	-3,88	0	-4,66	-2,39	-2,21	3,17	0,09	1,58	1,59	
A4_I2	-247,13	-172,58	-175,07	-136	-100,56	-67,96	-68,02	-10,58	-4,06	-6,49	-0,02	-7,08	-2,07	-4,56	3,08	0,41	1,58	1,52	
A4_I3	-247,18	-172,59	-175,16	-135,86	-100,56	-67,96	-67,9	-10,75	-4,06	-6,69	0,01	-7,13	-2,08	-4,65	3,22	0,41	1,58	1,64	
A4_I4	-244,64	-172,91	-172,64	-135,92	-100,89	-67,96	-67,96	-7,84	-4,06	-3,79	-0,01	-4,59	-2,4	-2,13	3,16	0,08	1,58	1,58	

Abbildung C24 :

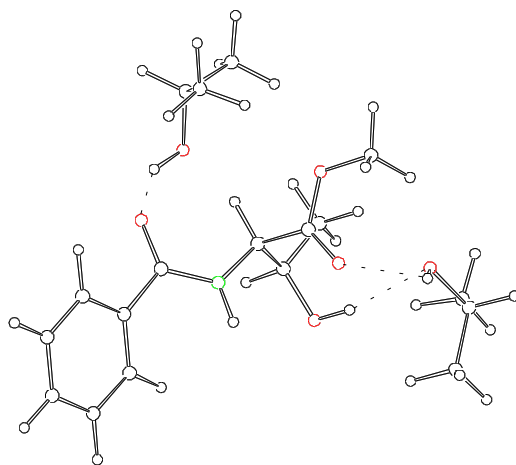


N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C24 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-217,36	-145,48	-145,36	-135,93	-73,47	-67,96	-67,96	-7,98	-4,05	-3,94	-0,02	-4,74	-2,4	-2,28	3,15	0,07	1,58	1,58	
A1_I2	-219,51	-145,27	-147,38	-135,95	-73,2	-67,96	-67,95	-10,4	-4,11	-6,23	-0,04	-6,89	-2,19	-4,3	3,13	0,34	1,58	1,59	
A1_I3	-219,51	-145,26	-147,36	-136	-73,19	-67,96	-68	-10,36	-4,11	-6,17	-0,04	-6,89	-2,18	-4,28	3,08	0,35	1,58	1,54	
A1_I4	-217,26	-145,47	-145,27	-135,94	-73,46	-67,96	-67,96	-7,88	-4,05	-3,85	-0,02	-4,64	-2,39	-2,19	3,14	0,08	1,58	1,58	
A2_I1	-218,64	-146,75	-145,23	-135,92	-73,32	-67,98	-67,96	-9,39	-5,45	-3,95	0,01	-6,02	-3,67	-2,15	3,16	0,22	1,56	1,58	
A2_I2	-220,66	-146,54	-147,26	-135,88	-73,11	-67,99	-67,95	-11,61	-5,44	-6,2	0,06	-8,04	-3,46	-4,18	3,2	0,43	1,55	1,59	
A2_I3	-220,66	-146,56	-147,25	-135,93	-73,11	-67,99	-68	-11,55	-5,46	-6,14	0,06	-8,04	-3,48	-4,17	3,15	0,43	1,55	1,54	
A2_I4	-218,58	-146,74	-145,13	-135,99	-73,33	-67,98	-67,96	-9,31	-5,43	-3,84	-0,05	-5,96	-3,66	-2,05	3,09	0,21	1,56	1,58	
A3_I1	-218,17	-146,29	-145,25	-135,89	-73,34	-67,97	-67,96	-8,9	-4,98	-3,95	0,04	-5,55	-3,21	-2,17	3,19	0,2	1,57	1,58	
A3_I2	-220,21	-146,08	-147,23	-135,91	-73,15	-67,97	-67,95	-11,14	-4,96	-6,14	0,01	-7,59	-3	-4,15	3,17	0,39	1,57	1,59	
A3_I3	-220,21	-146,08	-147,21	-135,96	-73,12	-67,97	-68	-11,12	-4,99	-6,09	0,02	-7,59	-3	-4,13	3,12	0,42	1,57	1,54	
A3_I4	-218,1	-146,29	-145,15	-135,93	-73,35	-67,97	-67,96	-8,82	-4,97	-3,84	0	-5,48	-3,21	-2,07	3,15	0,19	1,57	1,58	
A4_I1	-217,28	-145,37	-145,36	-135,95	-73,47	-67,96	-67,96	-7,9	-3,95	-3,94	-0,04	-4,66	-2,29	-2,28	3,13	0,07	1,58	1,58	
A4_I2	-219,46	-145,15	-147,38	-136	-73,19	-67,97	-67,95	-10,36	-4	-6,24	-0,08	-6,84	-2,07	-4,3	3,08	0,35	1,57	1,59	
A4_I3	-219,45	-145,16	-147,35	-136,03	-73,18	-67,96	-68	-10,31	-4,02	-6,17	-0,07	-6,83	-2,08	-4,27	3,05	0,36	1,58	1,54	
A4_I4	-217,12	-145,38	-145,26	-135,88	-73,46	-67,95	-67,96	-7,75	-3,96	-3,84	0,03	-4,5	-2,3	-2,18	3,2	0,08	1,59	1,58	

Abbildung C25 :

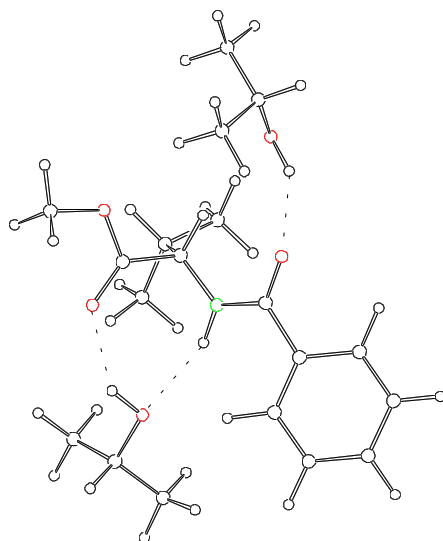


N-Benzoyl-threoninemethylester -Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C25 : Energien des N-Benzoyl-threoninemethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-296,37	-224,62	-224,37	-135,93	-152,61	-67,96	-67,95	-7,84	-4,05	-3,8	-0,02	-4,6	-2,39	-2,14	3,15	0,08	1,58	1,59	
A1_I2	-297,54	-223,73	-225,48	-135,99	-151,74	-67,96	-67,97	-9,87	-4,03	-5,77	-0,06	-5,77	-1,5	-3,25	3,09	0,95	1,58	1,57	
A1_I3	-296,49	-224,33	-224,5	-135,86	-152,32	-67,96	-67,92	-8,3	-4,05	-4,26	0,02	-4,72	-2,1	-2,27	3,22	0,37	1,58	1,62	
A1_I4	-296,36	-224,63	-224,38	-135,9	-152,63	-67,96	-67,95	-7,83	-4,05	-3,81	0	-4,59	-2,4	-2,15	3,18	0,06	1,58	1,59	
A2_I1	-297,43	-225,64	-224,3	-135,94	-152,55	-67,94	-67,96	-8,98	-5,15	-3,79	-0,04	-5,66	-3,41	-2,07	3,14	0,14	1,6	1,58	
A2_I2	-298,35	-224,83	-225,37	-135,77	-151,64	-67,94	-67,96	-10,81	-5,25	-5,77	0,13	-6,58	-2,6	-3,14	3,31	1,05	1,6	1,58	
A2_I3	-297,41	-225,36	-224,46	-135,85	-152,37	-67,94	-67,94	-9,16	-5,05	-4,15	0,03	-5,64	-3,13	-2,23	3,23	0,32	1,6	1,6	
A2_I4	-297,47	-225,65	-224,31	-135,97	-152,58	-67,94	-67,95	-9	-5,13	-3,78	-0,08	-5,7	-3,42	-2,08	3,11	0,11	1,6	1,59	
A3_I1	-296,56	-224,82	-224,23	-135,89	-152,5	-67,94	-67,96	-8,15	-4,38	-3,77	0,01	-4,79	-2,59	-2	3,19	0,19	1,6	1,58	
A3_I2	-297,4	-223,96	-225,27	-135,67	-151,57	-67,95	-67,96	-9,92	-4,44	-5,74	0,24	-5,63	-1,73	-3,04	3,41	1,12	1,59	1,58	
A3_I3	-296,63	-224,61	-224,37	-135,96	-152,42	-67,95	-67,95	-8,32	-4,25	-4,01	-0,06	-4,86	-2,38	-2,14	3,12	0,27	1,59	1,59	
A3_I4	-296,64	-224,83	-224,24	-135,95	-152,49	-67,94	-67,96	-8,25	-4,4	-3,79	-0,05	-4,87	-2,6	-2,01	3,13	0,2	1,6	1,58	
A4_I1	-296,31	-224,56	-224,36	-135,92	-152,6	-67,96	-67,96	-7,79	-4	-3,8	-0,01	-4,54	-2,33	-2,13	3,16	0,09	1,58	1,58	
A4_I2	-297,45	-223,65	-225,48	-135,98	-151,76	-67,96	-67,97	-9,77	-3,94	-5,75	-0,05	-5,68	-1,42	-3,25	3,1	0,93	1,58	1,57	
A4_I3	-296,45	-224,28	-224,48	-135,9	-152,32	-67,97	-67,92	-8,24	-3,99	-4,24	-0,01	-4,68	-2,05	-2,25	3,18	0,37	1,57	1,62	
A4_I4	-296,28	-224,57	-224,37	-135,86	-152,62	-67,96	-67,95	-7,76	-4	-3,81	0,04	-4,51	-2,34	-2,14	3,22	0,07	1,58	1,59	

Abbildung C26 :

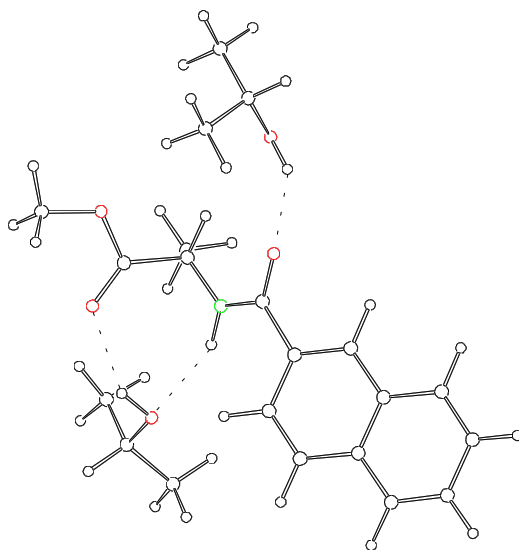


N-Benzoyl-valinmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C26 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-255,39	-183,58	-183,43	-135,9	-111,59	-67,96	-67,96	-7,89	-4,03	-3,89	0,01	-4,64	-2,37	-2,22	3,18	0,08	1,58	1,58	
A1_I2	-258,06	-183,28	-186,04	-135,98	-111,27	-67,97	-68,02	-10,8	-4,04	-6,75	0,01	-7,31	-2,07	-4,83	3,1	0,4	1,57	1,52	
A1_I3	-257,92	-183,29	-185,89	-135,98	-111,29	-67,97	-68	-10,67	-4,03	-6,61	-0,01	-7,17	-2,08	-4,68	3,1	0,38	1,57	1,54	
A1_I4	-255,41	-183,58	-183,43	-135,94	-111,6	-67,96	-67,97	-7,88	-4,02	-3,86	-0,01	-4,66	-2,37	-2,22	3,14	0,07	1,58	1,57	
A2_I1	-256,41	-184,58	-183,39	-135,91	-111,55	-67,96	-67,96	-8,94	-5,07	-3,88	0,01	-5,66	-3,37	-2,18	3,17	0,12	1,58	1,58	
A2_I2	-258,96	-184,14	-185,87	-135,87	-111,08	-67,97	-67,93	-11,97	-5,08	-6,85	0,03	-8,21	-2,93	-4,66	3,21	0,59	1,57	1,61	
A2_I3	-258,99	-184,32	-185,84	-136	-111,27	-67,98	-68	-11,74	-5,07	-6,56	-0,02	-8,24	-3,11	-4,63	3,08	0,4	1,56	1,54	
A2_I4	-256,47	-184,6	-183,4	-135,97	-111,56	-67,96	-67,97	-8,97	-5,07	-3,86	-0,04	-5,72	-3,39	-2,19	3,11	0,11	1,58	1,57	
A3_I1	-255,75	-183,93	-183,39	-135,91	-111,55	-67,99	-67,96	-8,26	-4,4	-3,89	0,04	-5	-2,72	-2,18	3,17	0,12	1,55	1,58	
A3_I2	-258,28	-183,5	-185,84	-135,96	-111,17	-67,98	-67,93	-11,2	-4,34	-6,74	-0,05	-7,53	-2,29	-4,63	3,12	0,5	1,56	1,61	
A3_I3	-258,32	-183,65	-185,82	-136,05	-111,3	-67,99	-68,01	-11,03	-4,36	-6,51	-0,06	-7,57	-2,44	-4,61	3,03	0,37	1,55	1,53	
A3_I4	-255,79	-183,95	-183,39	-135,96	-111,56	-67,99	-67,97	-8,27	-4,4	-3,86	0	-5,04	-2,74	-2,18	3,12	0,11	1,55	1,57	
A4_I1	-255,61	-183,78	-183,38	-135,92	-111,54	-67,97	-67,96	-8,15	-4,28	-3,89	0	-4,86	-2,57	-2,17	3,16	0,13	1,57	1,58	
A4_I2	-258	-183,27	-185,83	-135,87	-111,09	-67,96	-67,93	-11,02	-4,22	-6,81	0,02	-7,25	-2,06	-4,62	3,21	0,58	1,58	1,61	
A4_I3	-257,99	-183,49	-185,8	-135,98	-111,32	-67,97	-68,01	-10,69	-4,2	-6,47	0	-7,24	-2,28	-4,59	3,1	0,35	1,57	1,53	
A4_I4	-255,62	-183,8	-183,39	-135,93	-111,54	-67,96	-67,97	-8,15	-4,29	-3,88	0	-4,87	-2,59	-2,18	3,15	0,13	1,58	1,57	

Abbildung C27 :



N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregat

Tabelle C27 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H /(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	Gesamt	As A11	As A12	A11 A12	As	A11	A12	
A1_I1	-226,15	-154,34	-154,04	-135,9	-82,21	-67,95	-67,95	-8,04	-4,18	-3,88	0,01	-4,77	-2,5	-2,2	3,18	0,09	1,59	1,59	
A1_I2	-228,51	-154,01	-156,34	-135,98	-81,85	-67,96	-68,02	-10,69	-4,21	-6,47	0	-7,13	-2,17	-4,5	3,1	0,45	1,58	1,52	
A1_I3	-228,57	-154,02	-156,42	-135,85	-81,86	-67,96	-67,9	-10,86	-4,21	-6,67	0,01	-7,19	-2,18	-4,58	3,23	0,44	1,58	1,64	
A1_I4	-226,09	-154,35	-153,97	-135,92	-82,21	-67,95	-67,96	-7,97	-4,18	-3,8	-0,01	-4,71	-2,51	-2,13	3,16	0,09	1,59	1,58	
A2_I1	-226,34	-154,51	-154	-135,9	-82,16	-67,95	-67,96	-8,27	-4,4	-3,88	0,01	-4,96	-2,67	-2,16	3,18	0,14	1,59	1,58	
A2_I2	-228,72	-154,21	-156,31	-135,95	-81,83	-67,97	-68,02	-10,91	-4,41	-6,46	0,04	-7,34	-2,37	-4,47	3,13	0,47	1,57	1,52	
A2_I3	-228,89	-154,22	-156,39	-135,87	-81,83	-67,97	-67,87	-11,22	-4,42	-6,69	-0,03	-7,51	-2,38	-4,55	3,21	0,47	1,57	1,67	
A2_I4	-226,31	-154,52	-153,92	-135,96	-82,17	-67,95	-67,96	-8,24	-4,4	-3,79	-0,05	-4,93	-2,68	-2,08	3,12	0,13	1,59	1,58	
A3_I1	-225,68	-153,82	-153,78	-135,93	-81,96	-67,95	-67,96	-7,8	-3,91	-3,86	-0,02	-4,3	-1,98	-1,94	3,15	0,34	1,59	1,58	
A3_I2	-228,03	-153,42	-156,32	-135,98	-81,8	-67,95	-68,02	-10,25	-3,66	-6,5	-0,01	-6,65	-1,58	-4,48	3,1	0,5	1,59	1,52	
A3_I3	-228,16	-153,41	-156,4	-135,89	-81,81	-67,95	-67,88	-10,52	-3,65	-6,72	-0,06	-6,78	-1,57	-4,56	3,19	0,49	1,59	1,66	
A3_I4	-225,56	-153,84	-153,73	-135,87	-81,99	-67,95	-67,96	-7,66	-3,9	-3,78	0,04	-4,18	-2	-1,89	3,21	0,31	1,59	1,58	
A4_I1	-226,22	-154,39	-154,04	-135,91	-82,21	-67,95	-67,95	-8,1	-4,23	-3,88	0	-4,84	-2,55	-2,2	3,17	0,09	1,59	1,59	
A4_I2	-228,57	-154,06	-156,33	-136	-81,85	-67,96	-68,02	-10,74	-4,25	-6,46	-0,02	-7,19	-2,22	-4,49	3,08	0,45	1,58	1,52	
A4_I3	-228,61	-154,07	-156,42	-135,84	-81,86	-67,96	-67,9	-10,89	-4,25	-6,66	0,02	-7,23	-2,23	-4,58	3,24	0,44	1,58	1,64	

Abb. C28 : N-Benzoyl-alaninbenzylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

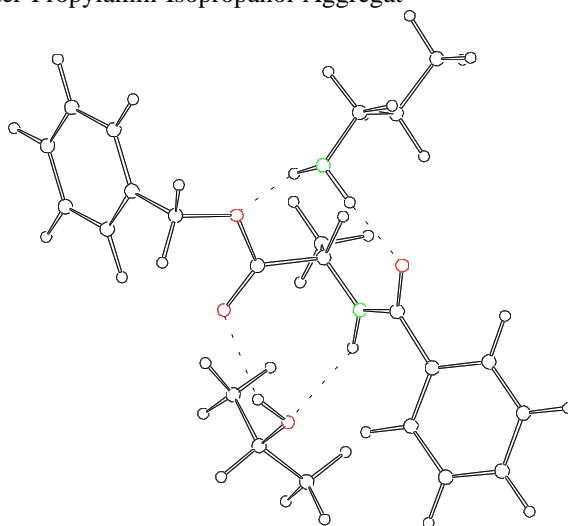


Tabelle C28 : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-170.41	-98.46	-144.46	-89.96	-72.48	-22.01	-67.97	-7.95	-3.98	-4.01	0.02	-6.01	-3.6	-2.14	1.66	0.3	0.07	1.57
A1_I4	-169.31	-97.36	-144.66	-89.92	-72.69	-21.96	-67.96	-6.7	-2.71	-4.01	0	-4.91	-2.5	-2.34	1.7	0.09	0.12	1.58
A1_I1	-169.92	-98.01	-144.42	-89.88	-72.47	-21.95	-67.96	-7.54	-3.59	-3.99	0.02	-5.52	-3.15	-2.1	1.74	0.31	0.13	1.58
A1_I2	-169.81	-97.87	-144.56	-89.91	-72.58	-21.99	-67.96	-7.28	-3.3	-4.02	0.04	-5.41	-3.01	-2.24	1.71	0.2	0.09	1.58
A2_I3	-170.86	-98.45	-144.8	-90.01	-72.47	-22.01	-67.96	-8.42	-3.97	-4.37	-0.04	-6.46	-3.59	-2.48	1.61	0.31	0.07	1.58
A2_I4	-169.67	-97.32	-144.96	-89.94	-72.64	-21.96	-67.95	-7.11	-2.72	-4.36	-0.03	-5.27	-2.46	-2.64	1.68	0.14	0.12	1.59
A2_I1	-170.32	-97.97	-144.79	-89.9	-72.44	-21.94	-67.95	-7.99	-3.59	-4.4	0	-5.92	-3.11	-2.47	1.72	0.34	0.14	1.59
A2_I2	-170.17	-97.84	-144.9	-89.89	-72.52	-22	-67.96	-7.68	-3.32	-4.41	0.07	-5.77	-2.98	-2.58	1.73	0.26	0.08	1.58
A3_I3	-169.93	-98.19	-144.05	-90.12	-72.46	-22.07	-67.97	-7.42	-3.65	-3.62	-0.08	-5.53	-3.33	-1.73	1.5	0.32	0.01	1.57
A3_I4	-168.97	-97.14	-144.31	-89.93	-72.51	-21.96	-67.95	-6.55	-2.67	-3.85	-0.01	-4.57	-2.28	-1.99	1.69	0.27	0.12	1.59
A3_I1	-169.45	-97.54	-144.28	-89.97	-72.45	-21.96	-67.95	-7.08	-3.13	-3.88	-0.06	-5.05	-2.68	-1.96	1.65	0.33	0.12	1.59
A3_I2	-169.36	-97.81	-144.07	-90.01	-72.6	-22	-67.97	-6.79	-3.21	-3.5	-0.04	-4.96	-2.95	-1.75	1.61	0.18	0.08	1.57
A4_I3	-170.46	-98.47	-144.53	-89.94	-72.49	-22.01	-67.96	-8.01	-3.97	-4.08	0.03	-6.06	-3.61	-2.21	1.68	0.29	0.07	1.58
A4_I4	-169.37	-97.37	-144.73	-89.91	-72.69	-21.96	-67.96	-6.76	-2.71	-4.08	0.01	-4.97	-2.51	-2.41	1.71	0.09	0.12	1.58
A4_I1	-169.99	-98.01	-144.49	-89.88	-72.47	-21.95	-67.96	-7.61	-3.59	-4.06	0.02	-5.59	-3.15	-2.17	1.74	0.31	0.13	1.58
A4_I2	-169.92	-97.87	-144.64	-89.94	-72.57	-21.99	-67.96	-7.4	-3.31	-4.11	0.01	-5.52	-3.01	-2.32	1.68	0.21	0.09	1.58
I1_A4	-170.36	-97.89	-144.98	-89.99	-72.48	-22.05	-67.96	-7.88	-3.36	-4.55	0.02	-5.96	-3.03	-2.66	1.63	0.3	0.03	1.58
I1_A3	-170.18	-97.73	-144.92	-89.95	-72.41	-22.03	-67.96	-7.78	-3.29	-4.55	0.03	-5.78	-2.87	-2.6	1.67	0.37	0.05	1.58
I1_A2	-170.19	-97.73	-144.98	-89.98	-72.47	-22.06	-67.96	-7.71	-3.21	-4.55	0.04	-5.79	-2.87	-2.66	1.64	0.31	0.02	1.58
I1_A1	-170.36	-97.89	-144.98	-89.99	-72.48	-22.05	-67.96	-7.88	-3.36	-4.55	0.02	-5.96	-3.03	-2.66	1.63	0.3	0.03	1.58
I1_A2/7	-170.19	-97.73	-144.98	-89.98	-72.47	-22.06	-67.96	-7.71	-3.21	-4.55	0.04	-5.79	-2.87	-2.66	1.64	0.31	0.02	1.58
I1_A3/6	-170.35	-97.93	-144.74	-89.94	-72.23	-22.02	-67.96	-8.13	-3.67	-4.55	0.04	-5.95	-3.07	-2.42	1.68	0.55	0.06	1.58
I2_A4	-172.24	-97.79	-146.78	-90.09	-72.37	-22.05	-68.02	-9.79	-3.37	-6.39	-0.02	-7.84	-2.93	-4.46	1.53	0.41	0.03	1.52
I2_A3	-172.13	-97.64	-146.77	-90.05	-72.36	-22.03	-68.02	-9.73	-3.26	-6.39	0	-7.73	-2.78	-4.45	1.57	0.42	0.05	1.52
I2_A2	-172.05	-97.57	-146.77	-90.08	-72.38	-22.05	-68.02	-9.6	-3.14	-6.38	-0.01	-7.65	-2.71	-4.45	1.54	0.4	0.03	1.52
I2_A1	-172.24	-97.79	-146.78	-90.09	-72.37	-22.05	-68.02	-9.79	-3.37	-6.39	-0.02	-7.84	-2.93	-4.46	1.53	0.41	0.03	1.52
I2_A2/7	-172.05	-97.57	-146.77	-90.08	-72.37	-22.05	-68.02	-9.6	-3.14	-6.38	-0.01	-7.65	-2.71	-4.45	1.54	0.41	0.03	1.52
I2_A3/6	-172.72	-98.03	-146.61	-90.11	-72.04	-22	-68.02	-10.66	-3.99	-6.55	-0.09	-8.32	-3.17	-4.29	1.51	0.74	0.08	1.52
I3_A4	-172.43	-97.81	-147	-89.98	-72.4	-22.05	-67.93	-10.06	-3.36	-6.68	0	-8.03	-2.95	-4.68	1.64	0.38	0.03	1.61
I3_A3	-172.36	-97.64	-146.99	-89.98	-72.38	-22.02	-67.93	-10.04	-3.24	-6.69	-0.03	-7.96	-2.78	-4.67	1.64	0.4	0.06	1.61
I3_A2	-172.3	-97.58	-146.99	-90.04	-72.41	-22.05	-67.93	-9.91	-3.12	-6.66	-0.06	-7.9	-2.72	-4.67	1.58	0.37	0.03	1.61
I3_A1	-172.43	-97.81	-147	-89.98	-72.4	-22.05	-67.93	-10.06	-3.36	-6.68	0	-8.03	-2.95	-4.68	1.64	0.38	0.03	1.61
I3_A2/7	-172.3	-97.58	-146.99	-90.04	-72.41	-22.05	-67.93	-9.91	-3.12	-6.66	-0.06	-7.9	-2.72	-4.67	1.58	0.37	0.03	1.61
<b>I3_A3/6</b>	<b>-172.83</b>	<b>-98.03</b>	<b>-146.77</b>	<b>-89.93</b>	<b>-72.08</b>	<b>-22</b>	<b>-67.86</b>	<b>-10.88</b>	<b>-3.95</b>	<b>-6.83</b>	<b>-0.06</b>	<b>-8.43</b>	<b>-3.17</b>	<b>-4.45</b>	<b>1.69</b>	<b>0.7</b>	<b>0.08</b>	<b>1.68</b>
I4_A4	-169.39	-98.1	-143.98	-90.01	-72.69	-22.05	-67.94	-6.71	-3.36	-3.35	-0.02	-4.99	-3.24	-1.66	1.61	0.09	0.03	1.6
I4_A3	-169.91	-97.73	-144.62	-90.02	-72.42	-22.02	-67.98	-7.5	-3.29	-4.23	-0.02	-5.51	-2.87	-2.3	1.6	0.36	0.06	1.56
I4_A2	-169.91	-97.73	-144.67	-90.02	-72.47	-22.05	-67.98	-7.41	-3.21	-4.22	0.01	-5.51	-2.87	-2.35	1.6	0.31	0.03	1.56
I4_A1	-169.39	-98.1	-143.98	-90.02	-72.69	-22.05	-67.94	-6.71	-3.36	-3.35	-0.02	-4.99	-3.24	-1.66	1.6	0.09	0.03	1.6
I4_A2/7	-169.91	-97.73	-144.67	-90.02	-72.47	-22.05	-67.98	-7.41	-3.21	-4.22	0.01	-5.51	-2.87	-2.35	1.6	0.31	0.03	1.56
I4_A3/6	-170.02	-97.94	-144.42	-89.9	-72.2	-22.02	-67.98	-7.82	-3.72	-4.24	0.1	-5.62	-3.08	-2.1	1.72	0.58	0.06	1.56

Abb. C29 : N-Benzoyl-alaninethylester Propylamin Isopropanol Aggregat

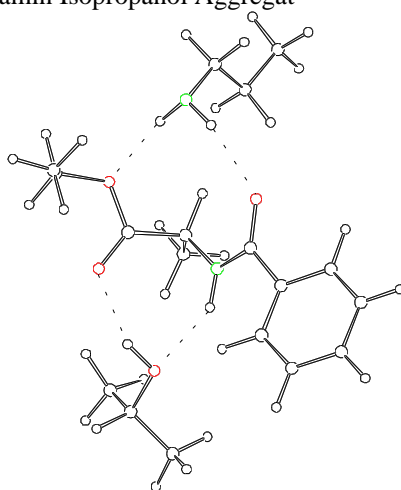


Tabelle C29 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylester Propylamin Isopropanol Aggregates

	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-204.85	-132.89	-178.57	-90	-106.59	-22.06	-67.97	-8.23	-4.24	-4.01	0.03	-6.32	-3.9	-2.12	1.62	0.32	0.02	1.57
A1_I4	-203.5	-131.55	-178.82	-90.01	-106.86	-22.05	-67.96	-6.62	-2.64	-4	0	-4.97	-2.56	-2.37	1.61	0.05	0.03	1.58
A1_I1	-203.76	-131.85	-178.81	-89.96	-106.86	-22.02	-67.96	-6.92	-2.97	-3.99	0.02	-5.23	-2.86	-2.36	1.66	0.05	0.06	1.58
A1_I2	-204.06	-132.11	-178.71	-89.91	-106.73	-21.99	-67.96	-7.38	-3.39	-4.02	0.04	-5.53	-3.12	-2.26	1.71	0.18	0.09	1.58
A2_I3	-204.94	-132.49	-178.94	-90.05	-106.56	-22.08	-67.97	-8.33	-3.85	-4.41	0	-6.41	-3.5	-2.49	1.57	0.35	0	1.57
A2_I4	-203.92	-131.52	-179.18	-90.03	-106.82	-22.04	-67.95	-7.1	-2.66	-4.4	-0.04	-5.39	-2.53	-2.73	1.59	0.09	0.04	1.59
A2_I1	-204.17	-131.81	-179.17	-89.96	-106.81	-22.03	-67.95	-7.38	-2.98	-4.41	0.02	-5.64	-2.82	-2.72	1.66	0.1	0.05	1.59
A2_I2	-204.43	-132.08	-179.09	-89.9	-106.69	-22	-67.97	-7.78	-3.39	-4.43	0.06	-5.9	-3.09	-2.64	1.72	0.22	0.08	1.57
A3_I3	-204.59	-132.86	-178.13	-90.06	-106.51	-22.05	-67.95	-8.07	-4.29	-3.66	-0.05	-6.06	-3.87	-1.68	1.56	0.4	0.03	1.59
A3_I4	-203.2	-131.33	-178.49	-90.01	-106.65	-22.04	-67.95	-6.56	-2.64	-3.88	-0.02	-4.67	-2.34	-2.04	1.61	0.26	0.04	1.59
A3_I1	-203.53	-131.62	-178.46	-90.04	-106.64	-22.01	-67.95	-6.92	-2.96	-3.87	-0.08	-5	-2.63	-2.01	1.58	0.27	0.07	1.59
A3_I2	-203.62	-132.07	-178.24	-90.01	-106.75	-22	-67.97	-6.9	-3.32	-3.52	-0.04	-5.09	-3.08	-1.79	1.61	0.16	0.08	1.57
A4_I3	-204.58	-132.52	-178.6	-90.04	-106.55	-22.08	-67.96	-8	-3.89	-4.09	0	-6.05	-3.53	-2.15	1.58	0.36	0	1.58
A4_I4	-203.56	-131.56	-178.89	-90.01	-106.86	-22.05	-67.96	-6.69	-2.64	-4.07	0	-5.03	-2.57	-2.44	1.61	0.05	0.03	1.58
A4_I1	-203.84	-131.86	-178.88	-89.96	-106.85	-22.03	-67.96	-7.01	-2.98	-4.07	0.02	-5.31	-2.87	-2.43	1.66	0.06	0.05	1.58
A4_I2	-204.16	-132.11	-178.78	-89.94	-106.72	-21.99	-67.96	-7.49	-3.4	-4.1	0.01	-5.63	-3.12	-2.33	1.68	0.19	0.09	1.58
I1_A4	-203.74	-132.24	-178.36	-90.03	-106.83	-22.05	-67.99	-6.87	-3.36	-3.55	0.01	-5.21	-3.25	-1.91	1.59	0.08	0.03	1.55
I1_A3	-203.66	-132.18	-178.36	-89.94	-106.82	-21.97	-67.99	-6.88	-3.38	-3.55	0.02	-5.13	-3.19	-1.91	1.68	0.09	0.11	1.55
I1_A2	-203.55	-132.04	-178.35	-90.01	-106.82	-22.06	-67.99	-6.68	-3.16	-3.54	0.03	-5.02	-3.05	-1.9	1.61	0.09	0.02	1.55
I1_A1	-203.74	-132.24	-178.36	-90.03	-106.83	-22.05	-67.99	-6.87	-3.36	-3.55	0.01	-5.21	-3.25	-1.91	1.59	0.08	0.03	1.55
I1_A2/7	-203.5	-132.03	-178.31	-90	-106.76	-22.04	-67.98	-6.72	-3.23	-3.57	0.03	-4.97	-3.04	-1.86	1.62	0.15	0.04	1.56
I1_A3/6	-203.76	-132.35	-178.14	-89.93	-106.59	-22.02	-67.99	-7.16	-3.74	-3.56	0.08	-5.23	-3.36	-1.69	1.69	0.32	0.06	1.55
I2_A4	-206.47	-131.93	-181.01	-90.09	-106.51	-22.05	-68.02	-9.88	-3.37	-6.48	-0.02	-7.94	-2.94	-4.56	1.53	0.4	0.03	1.52
I2_A3	-206.41	-131.87	-180.99	-90	-106.53	-21.98	-68.02	-9.88	-3.36	-6.44	0	-7.88	-2.88	-4.54	1.62	0.38	0.1	1.52
I2_A2	-206.3	-131.72	-181	-90.08	-106.51	-22.05	-68.02	-9.72	-3.16	-6.47	-0.01	-7.77	-2.73	-4.55	1.54	0.4	0.03	1.52
I2_A1	-206.47	-131.93	-181.01	-90.09	-106.51	-22.05	-68.02	-9.88	-3.37	-6.48	-0.02	-7.94	-2.94	-4.56	1.53	0.4	0.03	1.52
I2_A2/7	-206.45	-131.81	-180.96	-90.09	-106.38	-22.04	-68.02	-10.01	-3.38	-6.56	-0.03	-7.92	-2.82	-4.51	1.53	0.53	0.04	1.52
I2_A3/6	-206.93	-132.18	-180.88	-90.12	-106.26	-22	-68.02	-10.65	-3.92	-6.6	-0.1	-8.4	-3.19	-4.43	1.5	0.65	0.08	1.52
I3_A4	-206.55	-131.93	-181.12	-89.95	-106.51	-22.05	-67.89	-10.1	-3.37	-6.72	-0.01	-8.02	-2.94	-4.67	1.67	0.4	0.03	1.65
I3_A3	-206.58	-131.87	-181.11	-89.91	-106.51	-21.99	-67.88	-10.2	-3.37	-6.72	-0.04	-8.05	-2.88	-4.66	1.71	0.4	0.09	1.66
I3_A2	-206.46	-131.72	-181.1	-89.98	-106.49	-22.05	-67.87	-10.04	-3.17	-6.74	-0.06	-7.93	-2.73	-4.65	1.64	0.42	0.03	1.67
I3_A1	-206.55	-131.93	-181.12	-89.95	-106.51	-22.05	-67.89	-10.1	-3.37	-6.72	-0.01	-8.02	-2.94	-4.67	1.67	0.4	0.03	1.65
I3_A2/7	-206.56	-131.8	-181.08	-89.94	-106.38	-22.04	-67.87	-10.28	-3.38	-6.83	-0.03	-8.03	-2.81	-4.63	1.68	0.53	0.04	1.67
<b>I3_A3/6</b>	<b>-207.05</b>	<b>-132.19</b>	<b>-181</b>	<b>-89.92</b>	<b>-106.25</b>	<b>-22</b>	<b>-67.86</b>	<b>-10.93</b>	<b>-3.94</b>	<b>-6.89</b>	<b>-0.06</b>	<b>-8.52</b>	<b>-3.2</b>	<b>-4.55</b>	<b>1.7</b>	<b>0.66</b>	<b>0.08</b>	<b>1.68</b>
I4_A4	-203.84	-132.16	-178.44	-90.04	-106.75	-22.05	-67.98	-7.05	-3.36	-3.71	0	-5.31	-3.17	-1.99	1.58	0.16	0.03	1.56
I4_A3	-203.75	-132.2	-178.42	-89.98	-106.85	-21.98	-67.98	-6.94	-3.37	-3.58	-0.02	-5.22	-3.21	-1.97	1.64	0.06	0.1	1.56
I4_A2	-203.65	-131.96	-178.44	-90.05	-106.75	-22.05	-67.99	-6.87	-3.16	-3.71	-0.01	-5.12	-2.97	-1.99	1.57	0.16	0.03	1.55
I4_A1	-203.84	-132.16	-178.44	-90.04	-106.75	-22.05	-67.98	-7.05	-3.36	-3.71	0	-5.31	-3.17	-1.99	1.58	0.16	0.03	1.56
I4_A2/7	-203.57	-132.07	-178.35	-90.02	-106.79	-22.04	-67.98	-6.76	-3.23	-3.57	0	-5.04	-3.08	-1.9	1.6	0.12	0.04	1.56
I4_A3/6	-203.81	-132.4	-178.18	-89.89	-106.61	-22.02	-67.99	-7.19	-3.77	-3.58	0.12	-5.28	-3.41	-1.73	1.73	0.3	0.06	1.55

Abb. C30 : N-Benzoyl-alaninisopropylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

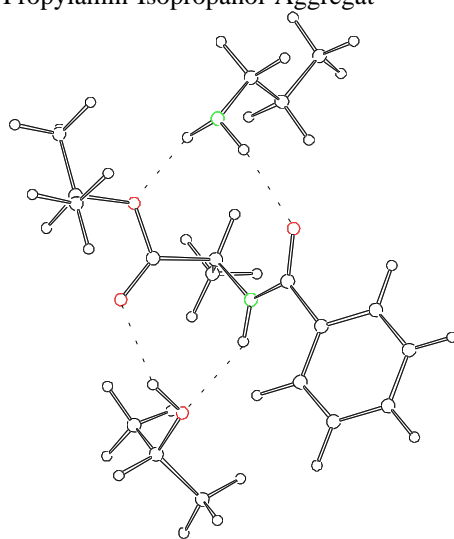


Tabelle C30 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-208.82	-136.85	-182.54	-90	-110.55	-22.06	-67.97	-8.24	-4.24	-4.02	0.03	-6.33	-3.9	-2.13	1.62	0.32	0.02	1.57
A1_I4	-207.5	-135.56	-182.79	-90	-110.82	-22.04	-67.96	-6.68	-2.7	-4.01	0	-5.01	-2.61	-2.38	1.62	0.05	0.04	1.58
A1_I1	-207.98	-136.07	-182.75	-89.92	-110.8	-21.98	-67.96	-7.23	-3.28	-3.99	0.02	-5.49	-3.12	-2.34	1.7	0.07	0.1	1.58
A1_I2	-208.04	-136.1	-182.68	-89.91	-110.69	-21.99	-67.96	-7.4	-3.41	-4.03	0.04	-5.55	-3.15	-2.27	1.71	0.18	0.09	1.58
A2_I3	-208.92	-136.42	-182.85	-90.05	-110.44	-22.08	-67.96	-8.45	-3.91	-4.45	-0.01	-6.43	-3.47	-2.44	1.57	0.43	0	1.58
A2_I4	-207.89	-135.51	-183.13	-90.03	-110.78	-22.04	-67.95	-7.12	-2.69	-4.4	-0.04	-5.4	-2.56	-2.72	1.59	0.09	0.04	1.59
A2_I1	-208.39	-136.02	-183.11	-89.92	-110.75	-21.97	-67.95	-7.71	-3.3	-4.41	0	-5.9	-3.07	-2.7	1.7	0.12	0.11	1.59
A2_I2	-208.42	-136.06	-183.02	-89.9	-110.61	-22	-67.96	-7.86	-3.45	-4.46	0.06	-5.93	-3.11	-2.61	1.72	0.26	0.08	1.58
A3_I3	-208.56	-136.82	-182.1	-90.06	-110.47	-22.05	-67.96	-8.08	-4.3	-3.67	-0.05	-6.07	-3.87	-1.69	1.56	0.4	0.03	1.58
A3_I4	-207.15	-135.33	-182.41	-90.01	-110.63	-22.03	-67.96	-6.54	-2.67	-3.83	-0.02	-4.66	-2.38	-2	1.61	0.24	0.05	1.58
A3_I1	-207.72	-135.84	-182.4	-90.01	-110.6	-22	-67.95	-7.17	-3.24	-3.85	-0.05	-5.23	-2.89	-1.99	1.61	0.27	0.08	1.59
A3_I2	-207.68	-136.07	-182.25	-89.94	-110.65	-22	-67.96	-7.09	-3.43	-3.65	0.01	-5.19	-3.12	-1.84	1.68	0.22	0.08	1.58
A4_I3	-208.54	-136.47	-182.56	-90.04	-110.5	-22.08	-67.96	-8	-3.89	-4.09	0	-6.05	-3.52	-2.15	1.58	0.37	0	1.58
A4_I4	-207.56	-135.56	-182.86	-89.99	-110.82	-22.04	-67.96	-6.74	-2.7	-4.08	0.01	-5.07	-2.61	-2.45	1.63	0.05	0.04	1.58
A4_I1	-208.06	-136.07	-182.82	-89.92	-110.8	-21.99	-67.96	-7.32	-3.29	-4.07	0.02	-5.57	-3.12	-2.41	1.7	0.07	0.09	1.58
A4_I2	-208.14	-136.09	-182.75	-89.94	-110.68	-21.99	-67.96	-7.51	-3.42	-4.11	0.01	-5.65	-3.14	-2.34	1.68	0.19	0.09	1.58
I1_A3	-207.71	-136.25	-182.29	-89.95	-110.78	-21.98	-67.99	-6.96	-3.49	-3.52	0.02	-5.22	-3.3	-1.88	1.67	0.09	0.1	1.55
I1_A2	-207.49	-136.01	-182.29	-90.02	-110.79	-22.05	-67.99	-6.65	-3.17	-3.51	0.03	-5	-3.06	-1.88	1.6	0.08	0.03	1.55
I1_A1	-207.68	-136.21	-182.29	-90.03	-110.79	-22.05	-67.99	-6.85	-3.36	-3.51	0.01	-5.19	-3.26	-1.88	1.59	0.08	0.03	1.55
I1_A2/7	-207.22	-135.74	-182.2	-89.99	-110.66	-22.04	-67.99	-6.53	-3.04	-3.56	0.04	-4.73	-2.79	-1.79	1.63	0.21	0.04	1.55
I1_A3/6	-207.81	-136.41	-181.95	-89.95	-110.42	-22.04	-67.99	-7.36	-3.96	-3.54	0.08	-5.32	-3.46	-1.54	1.67	0.45	0.04	1.55
I2_A4	-210.16	-135.23	-184.88	-90.56	-110.45	-21.97	-68.01	-9.74	-2.81	-6.42	-0.58	-7.67	-2.28	-4.47	1.06	0.42	0.11	1.53
I2_A3	-210.26	-135.91	-184.78	-89.9	-110.48	-21.97	-67.93	-9.88	-3.46	-6.37	0	-7.77	-2.96	-4.37	1.72	0.39	0.11	1.61
I2_A2	-210.14	-135.63	-184.8	-90	-110.39	-22.05	-67.92	-9.78	-3.19	-6.5	-0.03	-7.65	-2.68	-4.39	1.62	0.48	0.03	1.62
I2_A1	-210.24	-135.83	-184.82	-89.98	-110.4	-22.05	-67.93	-9.86	-3.38	-6.48	0.01	-7.75	-2.88	-4.41	1.64	0.47	0.03	1.61
I2_A2/7	-210.9	-136.13	-184.67	-90.07	-109.98	-22.03	-68.02	-10.87	-4.12	-6.67	-0.03	-8.41	-3.18	-4.26	1.55	0.89	0.05	1.52
I2_A3/6	-210.94	-136.25	-184.64	-89.97	-110.03	-22.01	-67.9	-11	-4.21	-6.72	-0.06	-8.45	-3.3	-4.23	1.65	0.84	0.07	1.64
I3_A4	-210.1	-135.21	-185	-90.26	-110.37	-22.05	-67.86	-9.81	-2.79	-6.77	-0.34	-7.61	-2.26	-4.59	1.36	0.5	0.03	1.68
I3_A3	-210.6	-135.96	-185.04	-89.91	-110.51	-21.97	-67.9	-10.22	-3.48	-6.63	-0.04	-8.11	-3.01	-4.63	1.71	0.36	0.11	1.64
I3_A2	-210.44	-135.69	-185.07	-89.98	-110.45	-22.05	-67.87	-10.08	-3.19	-6.76	-0.06	-7.95	-2.74	-4.66	1.64	0.42	0.03	1.67
I3_A1	-210.53	-135.89	-185.08	-89.94	-110.46	-22.05	-67.88	-10.14	-3.38	-6.74	-0.01	-8.04	-2.94	-4.67	1.68	0.41	0.03	1.66
I3_A2/7	-211.04	-136.15	-184.81	-89.94	-110.01	-22.03	-67.86	-11.14	-4.11	-6.94	-0.05	-8.55	-3.2	-4.4	1.68	0.86	0.05	1.68
<b>I3_A3/6</b>	<b>-211.16</b>	<b>-136.28</b>	<b>-184.89</b>	<b>-89.93</b>	<b>-110.11</b>	<b>-22.02</b>	<b>-67.86</b>	<b>-11.17</b>	<b>-4.15</b>	<b>-6.93</b>	<b>-0.05</b>	<b>-8.67</b>	<b>-3.33</b>	<b>-4.48</b>	<b>1.69</b>	<b>0.76</b>	<b>0.06</b>	<b>1.68</b>
I4_A3	-207.84	-136.2	-182.42	-89.98	-110.78	-21.98	-67.99	-7.1	-3.45	-3.66	-0.02	-5.35	-3.25	-2.01	1.64	0.09	0.1	1.55
I4_A2	-207.66	-135.92	-182.44	-90.05	-110.69	-22.05	-67.99	-6.93	-3.17	-3.76	-0.01	-5.17	-2.97	-2.03	1.57	0.18	0.03	1.55
I4_A1	-207.85	-136.11	-182.45	-90.04	-110.7	-22.05	-67.99	-7.11	-3.36	-3.76	0	-5.36	-3.16	-2.04	1.58	0.17	0.03	1.55
I4_A2/7	-207.66	-135.92	-182.44	-90.05	-110.69	-22.05	-67.99	-6.93	-3.17	-3.76	-0.01	-5.17	-2.97	-2.03	1.57	0.18	0.03	1.55
I4_A3/6	-207.91	-136.39	-182.05	-89.91	-110.38	-22.04	-67.99	-7.5	-3.97	-3.68	0.12	-5.42	-3.44	-1.64	1.71	0.49	0.04	1.55



Abb. C31 : N-Benzoyl-leucinmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

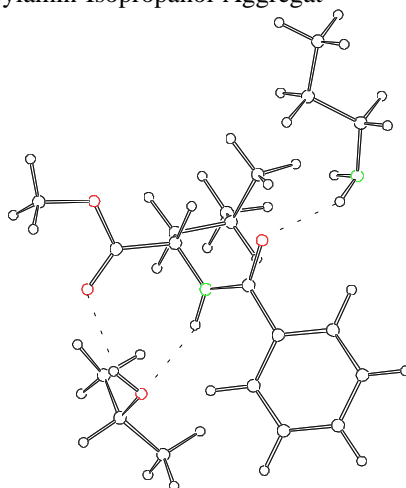


Tabelle C31 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-216.02	-143.9	-190.18	-90.02	-118.07	-22.08	-67.96	-7.91	-3.75	-4.15	0.01	-6.02	-3.44	-2.26	1.6	0.31	0	1.58
A1_I4	-215.2	-143.12	-190.4	-90.03	-118.31	-22.05	-67.96	-6.87	-2.76	-4.13	-0.01	-5.2	-2.66	-2.48	1.59	0.07	0.03	1.58
A1_I1	-215.21	-143.13	-190.4	-90.02	-118.31	-22.05	-67.96	-6.88	-2.77	-4.13	0	-5.21	-2.67	-2.48	1.6	0.07	0.03	1.58
A1_I2	-215.58	-143.51	-190.29	-89.9	-118.18	-22	-67.96	-7.44	-3.34	-4.15	0.06	-5.58	-3.05	-2.37	1.72	0.2	0.08	1.58
A2_I3	-216.35	-143.65	-190.33	-90.09	-117.73	-22.08	-67.99	-8.56	-3.85	-4.62	-0.03	-6.35	-3.19	-2.41	1.53	0.65	0	1.55
A2_I4	-215.39	-142.84	-190.57	-90.05	-118.03	-22.05	-67.98	-7.33	-2.76	-4.56	-0.02	-5.39	-2.38	-2.65	1.57	0.35	0.03	1.56
A2_I1	-215.39	-142.85	-190.57	-90.03	-118.03	-22.05	-67.98	-7.33	-2.77	-4.56	0	-5.39	-2.39	-2.65	1.59	0.35	0.03	1.56
A2_I2	-215.83	-143.27	-190.48	-89.95	-117.88	-22	-67.98	-7.97	-3.39	-4.62	0.04	-5.83	-2.81	-2.56	1.67	0.5	0.08	1.56
A3_I3	-216.42	-143.84	-190.24	-90.12	-117.78	-22.08	-67.98	-8.58	-3.98	-4.47	-0.06	-6.42	-3.38	-2.32	1.5	0.6	0	1.56
A3_I4	-215.34	-142.91	-190.55	-90.01	-118.09	-22.05	-67.97	-7.22	-2.76	-4.48	0.02	-5.34	-2.45	-2.63	1.61	0.29	0.03	1.57
A3_I1	-215.36	-142.92	-190.54	-90.01	-118.09	-22.05	-67.97	-7.25	-2.78	-4.48	0.02	-5.36	-2.46	-2.62	1.61	0.29	0.03	1.57
A3_I2	-215.85	-143.39	-190.43	-89.98	-117.99	-21.99	-67.98	-7.88	-3.41	-4.46	-0.01	-5.85	-2.93	-2.51	1.64	0.39	0.09	1.56
A4_I3	-216.19	-143.82	-190.13	-90.03	-117.78	-22.08	-67.97	-8.37	-3.96	-4.38	0.01	-6.19	-3.36	-2.21	1.59	0.6	0	1.57
A4_I4	-215.28	-143.11	-190.49	-90.02	-118.3	-22.05	-67.96	-6.97	-2.76	-4.23	0	-5.28	-2.65	-2.57	1.6	0.08	0.03	1.58
A4_I1	-215.29	-143.12	-190.49	-90.02	-118.29	-22.05	-67.96	-6.98	-2.77	-4.23	0	-5.29	-2.66	-2.57	1.6	0.09	0.03	1.58
A4_I2	-215.72	-143.48	-190.36	-89.94	-118.1	-21.99	-67.96	-7.66	-3.39	-4.3	0.02	-5.72	-3.02	-2.44	1.68	0.28	0.09	1.58
I1_A4	-215.71	-143.92	-190.12	-89.98	-118.31	-22.04	-67.95	-7.41	-3.57	-3.86	0.01	-5.71	-3.46	-2.2	1.64	0.07	0.04	1.59
I1_A3	-215.27	-143.5	-190.01	-89.95	-118.18	-22.02	-67.96	-7.11	-3.3	-3.87	0.03	-5.27	-3.04	-2.09	1.67	0.2	0.06	1.58
I1_A2	-215.24	-143.45	-190.09	-89.96	-118.26	-22.06	-67.96	-6.97	-3.14	-3.88	0.05	-5.24	-2.99	-2.17	1.66	0.12	0.02	1.58
I1_A1	-215.61	-143.82	-190.13	-90	-118.3	-22.05	-67.95	-7.3	-3.46	-3.87	0.01	-5.61	-3.36	-2.21	1.62	0.08	0.03	1.59
I1_A2/7	-215.24	-143.45	-190.09	-89.96	-118.26	-22.06	-67.96	-6.97	-3.14	-3.88	0.05	-5.24	-2.99	-2.17	1.66	0.12	0.02	1.58
I1_A3/6	-215.2	-143.43	-190.12	-89.98	-118.3	-22.05	-67.96	-6.9	-3.08	-3.86	0.02	-5.2	-2.97	-2.2	1.64	0.08	0.03	1.58
I2_A4	-217.81	-143.57	-192.21	-89.97	-117.96	-22.04	-67.92	-9.89	-3.56	-6.33	-0.01	-7.81	-3.11	-4.29	1.65	0.42	0.04	1.62
I2_A3	-217.85	-143.32	-192.19	-89.96	-117.71	-22.02	-67.94	-10.18	-3.59	-6.54	0	-7.85	-2.86	-4.27	1.66	0.67	0.06	1.6
I2_A2	-217.67	-143.12	-192.19	-90.01	-117.71	-22.05	-67.93	-9.96	-3.35	-6.54	-0.02	-7.67	-2.66	-4.27	1.61	0.67	0.03	1.61
I2_A1	-217.67	-143.46	-192.21	-89.96	-117.99	-22.05	-67.92	-9.71	-3.42	-6.3	0.01	-7.67	-3	-4.29	1.66	0.39	0.03	1.62
I2_A2/7	-217.67	-143.12	-192.19	-90.01	-117.71	-22.05	-67.93	-9.96	-3.35	-6.54	-0.02	-7.67	-2.66	-4.27	1.61	0.67	0.03	1.61
I2_A3/6	-217.51	-143.14	-192.2	-89.92	-117.96	-21.93	-67.92	-9.7	-3.25	-6.33	-0.08	-7.51	-2.68	-4.28	1.7	0.42	0.15	1.62
<b>I3_A4</b>	<b>-218.17</b>	<b>-143.6</b>	<b>-192.55</b>	<b>-89.94</b>	<b>-118</b>	<b>-22.04</b>	<b>-67.88</b>	<b>-10.24</b>	<b>-3.56</b>	<b>-6.66</b>	<b>-0.01</b>	<b>-8.17</b>	<b>-3.14</b>	<b>-4.63</b>	<b>1.68</b>	<b>0.38</b>	<b>0.04</b>	<b>1.66</b>
I3_A3	-218.11	-143.34	-192.42	-89.91	-117.75	-22.02	-67.86	-10.49	-3.57	-6.81	-0.04	-8.11	-2.88	-4.5	1.71	0.63	0.06	1.68
I3_A2	-217.93	-143.14	-192.42	-89.97	-117.76	-22.05	-67.85	-10.27	-3.33	-6.81	-0.06	-7.93	-2.68	-4.5	1.65	0.62	0.03	1.69
I3_A1	-218.05	-143.52	-192.54	-89.95	-118.04	-22.05	-67.89	-10.07	-3.43	-6.62	-0.01	-8.05	-3.06	-4.62	1.67	0.34	0.03	1.65
I3_A2/7	-217.93	-143.14	-192.42	-89.97	-117.76	-22.05	-67.85	-10.27	-3.33	-6.81	-0.06	-7.93	-2.68	-4.5	1.65	0.62	0.03	1.69
I3_A3/6	-218.05	-143.52	-192.54	-89.95	-118.04	-22.05	-67.89	-10.07	-3.43	-6.62	-0.01	-8.05	-3.06	-4.62	1.67	0.34	0.03	1.65
I4_A4	-215.67	-143.93	-190.08	-90	-118.31	-22.04	-67.96	-7.37	-3.58	-3.81	0	-5.67	-3.47	-2.16	1.62	0.07	0.04	1.58
I4_A3	-215.26	-143.5	-189.94	-90.01	-118.17	-22.02	-67.96	-7.11	-3.31	-3.81	-0.03	-5.26	-3.04	-2.02	1.61	0.21	0.06	1.58
I4_A2	-215.19	-143.45	-190.05	-90	-118.29	-22.05	-67.96	-6.88	-3.1	-3.8	0.02	-5.19	-2.99	-2.13	1.62	0.09	0.03	1.58
I4_A1	-215.58	-143.82	-190.08	-90.02	-118.31	-22.05	-67.96	-7.26	-3.46	-3.81	-0.01	-5.58	-3.36	-2.16	1.6	0.07	0.03	1.58
I4_A2/7	-215.19	-143.45	-190.06	-90	-118.29	-22.05	-67.96	-6.88	-3.1	-3.81	0.02	-5.19	-2.99	-2.14	1.62	0.09	0.03	1.58
I4_A3/6	-215.12	-143.43	-190.08	-89.95	-118.31	-22.05	-67.96	-6.8	-3.07	-3.81	0.06	-5.12	-2.97	-2.16	1.67	0.07	0.03	1.58

Abb. C32 : N-Benzoyl-alaninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

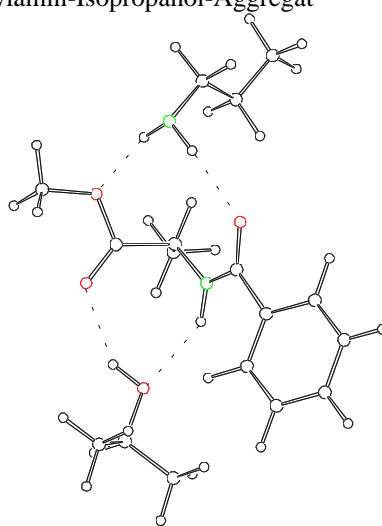


Tabelle C32 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-198.59	-126.59	-172.57	-90.04	-100.59	-22.08	-67.97	-7.95	-3.92	-4.01	0.01	-6	-3.54	-2.06	1.58	0.38	0	1.57
A1_I4	-197.65	-125.71	-172.87	-90.01	-100.92	-22.05	-67.96	-6.72	-2.74	-3.99	0	-5.06	-2.66	-2.36	1.61	0.05	0.03	1.58
A1_I1	-197.67	-125.73	-172.87	-90.01	-100.92	-22.05	-67.96	-6.74	-2.76	-3.99	0	-5.08	-2.68	-2.36	1.61	0.05	0.03	1.58
A1_I2	-198.11	-126.17	-172.76	-89.9	-100.78	-21.99	-67.96	-7.38	-3.4	-4.02	0.04	-5.52	-3.12	-2.25	1.72	0.19	0.09	1.58
A2_I3	-199.04	-126.56	-172.99	-90.06	-100.58	-22.08	-67.97	-8.41	-3.9	-4.44	-0.01	-6.45	-3.51	-2.48	1.56	0.39	0	1.57
A2_I4	-198.04	-125.66	-173.22	-90.03	-100.87	-22.05	-67.95	-7.17	-2.74	-4.4	-0.03	-5.45	-2.61	-2.71	1.59	0.1	0.03	1.59
A2_I1	-198.05	-125.68	-173.22	-90.02	-100.87	-22.05	-67.95	-7.18	-2.76	-4.4	-0.01	-5.46	-2.63	-2.71	1.6	0.1	0.03	1.59
A2_I2	-198.51	-126.14	-173.13	-89.89	-100.71	-21.99	-67.96	-7.84	-3.43	-4.46	0.07	-5.92	-3.09	-2.62	1.73	0.26	0.09	1.58
A3_I3	-198.67	-126.92	-172.2	-90.05	-100.57	-22.05	-67.95	-8.1	-4.3	-3.68	-0.05	-6.08	-3.87	-1.69	1.57	0.4	0.03	1.59
A3_I4	-197.33	-125.47	-172.55	-89.99	-100.7	-22.05	-67.95	-6.63	-2.72	-3.9	0.01	-4.74	-2.42	-2.04	1.63	0.27	0.03	1.59
A3_I1	-197.37	-125.49	-172.54	-90.02	-100.69	-22.05	-67.95	-6.68	-2.75	-3.9	-0.02	-4.78	-2.44	-2.03	1.6	0.28	0.03	1.59
A3_I2	-197.7	-126.13	-172.31	-90	-100.8	-22	-67.97	-6.93	-3.33	-3.54	-0.04	-5.11	-3.08	-1.8	1.62	0.17	0.08	1.57
A4_I3	-198.65	-126.58	-172.65	-90.04	-100.61	-22.08	-67.96	-8	-3.9	-4.08	0	-6.06	-3.53	-2.14	1.58	0.36	0	1.58
A4_I4	-197.72	-125.71	-172.94	-90.01	-100.92	-22.05	-67.96	-6.79	-2.74	-4.06	0	-5.13	-2.66	-2.43	1.61	0.05	0.03	1.58
A4_I1	-197.74	-125.74	-172.94	-90.01	-100.92	-22.05	-67.96	-6.8	-2.76	-4.06	0	-5.15	-2.69	-2.43	1.61	0.05	0.03	1.58
A4_I2	-198.2	-126.17	-172.82	-89.93	-100.77	-21.99	-67.96	-7.49	-3.41	-4.09	0.01	-5.61	-3.12	-2.31	1.69	0.2	0.09	1.58
I1_A4	-197.69	-125.9	-172.73	-89.92	-100.9	-21.98	-67.95	-6.85	-3.02	-3.88	0.02	-5.1	-2.85	-2.22	1.7	0.07	0.1	1.59
I1_A3	-197.94	-126.16	-172.66	-89.95	-100.84	-22.02	-67.95	-7.13	-3.3	-3.87	0.03	-5.35	-3.11	-2.15	1.67	0.13	0.06	1.59
I1_A2	-197.91	-126.12	-172.72	-89.97	-100.89	-22.06	-67.96	-7.01	-3.17	-3.87	0.04	-5.32	-3.07	-2.21	1.65	0.08	0.02	1.58
I1_A1	-198.11	-126.31	-172.73	-90	-100.9	-22.05	-67.95	-7.2	-3.35	-3.87	0.01	-5.52	-3.26	-2.22	1.62	0.07	0.03	1.59
I1_A2/7	-197.69	-125.96	-172.14	-89.94	-100.3	-22.03	-67.96	-7.4	-3.62	-3.88	0.05	-5.1	-2.91	-1.63	1.68	0.67	0.05	1.58
I1_A3/6	-197.94	-126.2	-172.44	-89.94	-100.6	-22.03	-67.96	-7.35	-3.57	-3.88	0.05	-5.35	-3.15	-1.93	1.68	0.37	0.05	1.58
I2_A4	-200.54	-125.99	-175.09	-90.09	-100.57	-22.05	-68.02	-9.89	-3.36	-6.49	-0.02	-7.95	-2.94	-4.58	1.53	0.4	0.03	1.52
I2_A3	-200.54	-125.92	-175.06	-90.04	-100.51	-22.02	-68.02	-9.98	-3.38	-6.53	0	-7.95	-2.87	-4.55	1.58	0.46	0.06	1.52
I2_A2	-200.39	-125.8	-175.08	-90.08	-100.57	-22.05	-68.02	-9.74	-3.17	-6.49	-0.01	-7.8	-2.75	-4.57	1.54	0.4	0.03	1.52
I2_A1	-200.54	-125.99	-175.09	-90.09	-100.57	-22.05	-68.02	-9.89	-3.36	-6.49	-0.02	-7.95	-2.94	-4.58	1.53	0.4	0.03	1.52
I2_A2/7	-200.62	-125.82	-174.72	-90.07	-99.99	-22.02	-68.02	-10.59	-3.81	-6.71	-0.03	-8.03	-2.77	-4.21	1.55	0.98	0.06	1.52
I2_A3/6	-200.8	-126.02	-174.9	-90.12	-100.24	-22.01	-68.02	-10.53	-3.77	-6.64	-0.09	-8.21	-2.97	-4.39	1.5	0.73	0.07	1.52
I3_A4	-200.61	-125.99	-175.19	-89.96	-100.58	-22.05	-67.9	-10.08	-3.36	-6.71	-0.01	-8.02	-2.94	-4.68	1.66	0.39	0.03	1.64
I3_A3	-200.68	-125.92	-175.17	-89.94	-100.51	-22.02	-67.88	-10.27	-3.39	-6.78	-0.04	-8.09	-2.87	-4.66	1.68	0.46	0.06	1.66
I3_A2	-200.54	-125.79	-175.18	-89.99	-100.56	-22.05	-67.88	-10.04	-3.18	-6.74	-0.06	-7.95	-2.74	-4.67	1.63	0.41	0.03	1.66
I3_A1	-200.61	-125.99	-175.19	-89.96	-100.58	-22.05	-67.9	-10.08	-3.36	-6.71	-0.01	-8.02	-2.94	-4.68	1.66	0.39	0.03	1.64
I3_A2/7	-200.63	-125.77	-174.93	-89.93	-100.15	-22.03	-67.86	-10.59	-3.59	-6.92	-0.04	-8.04	-2.72	-4.42	1.69	0.82	0.05	1.68
<b>I3_A3/6</b>	<b>-200.9</b>	<b>-126.03</b>	<b>-175.01</b>	<b>-89.93</b>	<b>-100.24</b>	<b>-22.01</b>	<b>-67.86</b>	<b>-10.79</b>	<b>-3.78</b>	<b>-6.91</b>	<b>-0.06</b>	<b>-8.31</b>	<b>-2.98</b>	<b>-4.5</b>	<b>1.69</b>	<b>0.73</b>	<b>0.07</b>	<b>1.68</b>
I4_A4	-197.62	-125.92	-172.65	-89.93	-100.91	-21.98	-67.96	-6.78	-3.03	-3.79	0.01	-5.03	-2.87	-2.14	1.69	0.06	0.1	1.58
I4_A3	-197.92	-126.17	-172.58	-90.01	-100.83	-22.02	-67.96	-7.11	-3.32	-3.79	-0.03	-5.33	-3.12	-2.07	1.61	0.14	0.06	1.58
I4_A2	-197.87	-126.13	-172.65	-90.01	-100.9	-22.06	-67.96	-6.96	-3.17	-3.79	0	-5.28	-3.08	-2.14	1.61	0.07	0.02	1.58
I4_A1	-198.05	-126.31	-172.65	-90.02	-100.91	-22.05	-67.96	-7.13	-3.35	-3.79	-0.01	-5.46	-3.26	-2.14	1.6	0.06	0.03	1.58
I4_A2/7	-197.87	-126.13	-172.65	-90.01	-100.9	-22.06	-67.96	-6.96	-3.17	-3.79	0	-5.28	-3.08	-2.14	1.61	0.07	0.02	1.58
I4_A3/6	-197.8	-126.21	-172.36	-89.87	-100.61	-22.03	-67.96	-7.2	-3.57	-3.79	0.12	-5.21	-3.16	-1.85	1.75	0.36	0.05	1.58

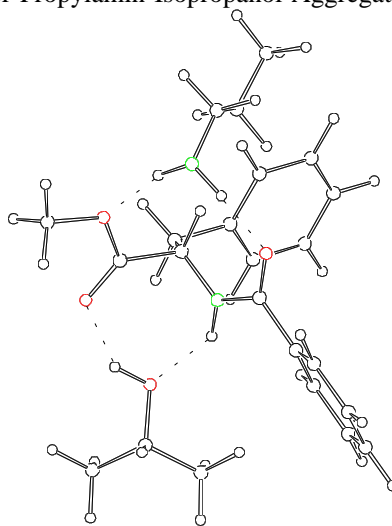


Tabelle C33 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I2	-171.05	-98.98	-145.35	-89.97	-73.3	-22	-67.96	-7.79	-3.68	-4.09	-0.01	-5.89	-3.36	-2.27	1.65	0.24	0.08	1.58
A2_I3	-172.76	-99.27	-146.64	-90.05	-73.18	-22.08	-67.99	-9.51	-4.01	-5.47	0.01	-7.6	-3.65	-3.56	1.57	0.36	0	1.55
A2_I4	-171.67	-98.23	-146.78	-90.06	-73.36	-22.05	-67.98	-8.28	-2.82	-5.44	-0.03	-6.51	-2.61	-3.7	1.56	0.18	0.03	1.56
A2_I1	-171.68	-98.25	-146.77	-90.04	-73.35	-22.05	-67.98	-8.3	-2.85	-5.44	-0.01	-6.52	-2.63	-3.69	1.58	0.19	0.03	1.56
A2_I2	-172.29	-98.87	-146.64	-89.96	-73.19	-22.01	-67.99	-9.11	-3.67	-5.46	0.03	-7.13	-3.25	-3.56	1.66	0.35	0.07	1.55
A3_I3	-172.3	-99.24	-146.17	-90.08	-73.19	-22.08	-67.97	-9.06	-3.98	-5.01	-0.03	-7.14	-3.62	-3.09	1.54	0.35	0	1.57
A3_I4	-171.21	-98.26	-146.33	-90.01	-73.38	-22.05	-67.97	-7.8	-2.82	-4.98	0.01	-6.05	-2.64	-3.25	1.61	0.16	0.03	1.57
A3_I1	-171.22	-98.28	-146.33	-90	-73.38	-22.05	-67.97	-7.82	-2.85	-4.98	0.02	-6.06	-2.66	-3.25	1.62	0.16	0.03	1.57
A4_I3	-171.38	-99.34	-145.24	-90.08	-73.27	-22.08	-67.96	-8.08	-4	-4.01	-0.04	-6.22	-3.72	-2.16	1.54	0.27	0	1.58
A4_I4	-170.24	-98.36	-145.4	-90.01	-73.5	-22.05	-67.96	-6.74	-2.81	-3.95	0	-5.08	-2.74	-2.32	1.61	0.04	0.03	1.58
A4_I1	-170.29	-98.39	-145.4	-90.04	-73.5	-22.05	-67.96	-6.78	-2.84	-3.95	-0.03	-5.13	-2.77	-2.32	1.58	0.04	0.03	1.58
A4_I2	-170.99	-98.97	-145.25	-90.01	-73.29	-22	-67.96	-7.75	-3.69	-4	-0.05	-5.83	-3.35	-2.17	1.61	0.25	0.08	1.58
I1_A4	-170.78	-98.89	-145.38	-90.03	-73.48	-22.05	-67.96	-7.29	-3.35	-3.94	-0.02	-5.62	-3.27	-2.3	1.59	0.06	0.03	1.58
I1_A3	-171.15	-99.31	-145.33	-89.95	-73.44	-22.01	-67.96	-7.74	-3.85	-3.93	0.02	-5.99	-3.69	-2.25	1.67	0.1	0.07	1.58
I1_A2	-171.07	-99.2	-145.36	-89.97	-73.45	-22.05	-67.96	-7.61	-3.7	-3.95	0.04	-5.91	-3.58	-2.28	1.65	0.09	0.03	1.58
I1_A1	-170.78	-98.89	-145.38	-90.03	-73.48	-22.05	-67.96	-7.29	-3.35	-3.94	-0.02	-5.62	-3.27	-2.3	1.59	0.06	0.03	1.58
I1_A2/7	-171.16	-99.37	-145.07	-89.93	-73.18	-22.02	-67.96	-8	-4.17	-3.93	0.05	-6	-3.75	-1.99	1.69	0.36	0.06	1.58
I1_A3/6	-170.78	-99	-145.03	-89.92	-73.15	-22.02	-67.96	-7.66	-3.83	-3.92	0.06	-5.62	-3.38	-1.95	1.7	0.39	0.06	1.58
I2_A4	-172.93	-98.68	-147.4	-90.06	-73.21	-22.05	-67.95	-9.72	-3.41	-6.23	-0.06	-7.77	-3.06	-4.32	1.56	0.33	0.03	1.59
I2_A3	-173.28	-99.13	-147.36	-89.93	-73.21	-22.01	-67.95	-10.11	-3.91	-6.2	0.03	-8.12	-3.51	-4.28	1.69	0.33	0.07	1.59
I2_A2	-173.18	-98.98	-147.37	-90	-73.2	-22.05	-67.95	-9.98	-3.73	-6.22	0	-8.02	-3.36	-4.29	1.62	0.34	0.03	1.59
I2_A1	-172.93	-98.68	-147.4	-90.06	-73.21	-22.05	-67.95	-9.72	-3.41	-6.23	-0.06	-7.77	-3.06	-4.32	1.56	0.33	0.03	1.59
I2_A2/7	-173.51	-99.26	-147.22	-90.03	-73.05	-22.01	-67.95	-10.49	-4.2	-6.21	-0.07	-8.35	-3.64	-4.14	1.59	0.49	0.07	1.59
I2_A3/6	-173.19	-98.91	-147.22	-89.97	-72.98	-22.01	-67.95	-10.24	-3.91	-6.29	-0.01	-8.03	-3.29	-4.14	1.65	0.56	0.07	1.59
I3_A4	-172.93	-98.66	-147.38	-90.11	-73.2	-22.05	-68	-9.67	-3.41	-6.17	-0.06	-7.77	-3.04	-4.3	1.51	0.34	0.03	1.54
I3_A3	-173.28	-99.13	-147.35	-89.99	-73.2	-22.01	-68	-10.06	-3.92	-6.14	0.02	-8.12	-3.51	-4.27	1.63	0.34	0.07	1.54
I3_A2	-173.17	-98.99	-147.34	-90.05	-73.19	-22.05	-68.01	-9.93	-3.75	-6.15	0.01	-8.01	-3.37	-4.26	1.57	0.35	0.03	1.53
I3_A1	-172.93	-98.66	-147.38	-90.11	-73.2	-22.05	-68	-9.67	-3.41	-6.17	-0.06	-7.77	-3.04	-4.3	1.51	0.34	0.03	1.54
<b>I3_A2/7</b>	<b>-173.54</b>	<b>-99.28</b>	<b>-147.2</b>	<b>-90.09</b>	<b>-73.03</b>	<b>-22.01</b>	<b>-68</b>	<b>-10.5</b>	<b>-4.24</b>	<b>-6.17</b>	<b>-0.08</b>	<b>-8.38</b>	<b>-3.66</b>	<b>-4.12</b>	<b>1.53</b>	<b>0.51</b>	<b>0.07</b>	<b>1.54</b>
I3_A3/6	-173.13	-98.85	-147.12	-90.04	-72.91	-22.01	-68	-10.21	-3.93	-6.22	-0.03	-7.97	-3.23	-4.04	1.58	0.63	0.07	1.54
I4_A4	-170.65	-98.89	-145.28	-90	-73.48	-22.05	-67.96	-7.16	-3.35	-3.84	0.01	-5.49	-3.27	-2.2	1.62	0.06	0.03	1.58
I4_A3	-171.12	-99.31	-145.22	-90.01	-73.41	-22.02	-67.96	-7.74	-3.88	-3.85	-0.04	-5.96	-3.69	-2.14	1.61	0.13	0.06	1.58
I4_A2	-171.01	-99.2	-145.26	-90.02	-73.45	-22.05	-67.96	-7.55	-3.7	-3.85	-0.01	-5.85	-3.58	-2.18	1.6	0.09	0.03	1.58
I4_A1	-170.65	-98.89	-145.28	-90	-73.48	-22.05	-67.96	-7.16	-3.35	-3.84	0.01	-5.49	-3.27	-2.2	1.62	0.06	0.03	1.58
I4_A2/7	-171.01	-99.36	-144.94	-89.87	-73.16	-22.02	-67.96	-7.87	-4.18	-3.82	0.11	-5.85	-3.74	-1.86	1.75	0.38	0.06	1.58
I4_A3/6	-170.68	-98.93	-144.79	-89.98	-73	-22.02	-67.96	-7.71	-3.92	-3.84	-0.01	-5.52	-3.31	-1.71	1.64	0.54	0.06	1.58

Abb. C34 : N-Benzoyl-threoninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

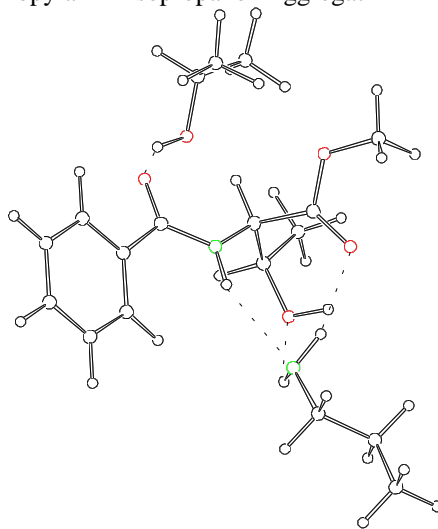


Tabelle C34 : Energien des N-Benzoyl-threoninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)							
Substruktur	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	
A1_I3	-250.32	-178.29	-224.55	-90.04	-152.56	-22.07	-67.96	-7.72	-3.66	-4.03	-0.01	-6.01	-3.52	-2.32	1.58	0.13	0.01	1.58	
A1_I4	-249.55	-177.58	-224.65	-90	-152.64	-22.04	-67.96	-6.91	-2.89	-4.05	0	-5.24	-2.81	-2.42	1.62	0.05	0.04	1.58	
A1_I1	-249.39	-177.4	-224.65	-90.02	-152.65	-22.05	-67.96	-6.74	-2.7	-4.05	-0.01	-5.08	-2.63	-2.42	1.6	0.04	0.03	1.58	
A1_I2	-250.66	-178.68	-224.29	-90.03	-152.3	-22.08	-67.96	-8.32	-4.3	-4.03	0.01	-6.35	-3.91	-2.06	1.59	0.39	0	1.58	
A2_I3	-251.52	-178.2	-225.5	-90.03	-152.29	-22.06	-67.94	-9.23	-3.85	-5.26	-0.03	-7.21	-3.43	-3.27	1.59	0.4	0.02	1.6	
A2_I4	-250.65	-177.49	-225.68	-90.03	-152.56	-22.04	-67.94	-8.11	-2.89	-5.17	-0.05	-6.34	-2.72	-3.45	1.59	0.13	0.04	1.6	
A2_I1	-250.47	-177.32	-225.68	-90.04	-152.57	-22.05	-67.94	-7.91	-2.69	-5.16	-0.05	-6.16	-2.55	-3.45	1.58	0.12	0.03	1.6	
<b>A2_I2</b>	<b>-252.07</b>	<b>-178.62</b>	<b>-225.25</b>	<b>-90.1</b>	<b>-151.98</b>	<b>-22.08</b>	<b>-67.94</b>	<b>-10.08</b>	<b>-4.57</b>	<b>-5.33</b>	<b>-0.08</b>	<b>-7.76</b>	<b>-3.85</b>	<b>-3.02</b>	<b>1.52</b>	<b>0.71</b>	<b>0</b>	<b>1.6</b>	
A3_I3	-250.74	-178.11	-224.62	-90.06	-152.13	-22.05	-67.95	-8.61	-3.93	-4.54	-0.06	-6.43	-3.34	-2.39	1.56	0.56	0.03	1.59	
A3_I4	-249.81	-177.43	-224.85	-90	-152.52	-22.03	-67.94	-7.31	-2.88	-4.39	-0.03	-5.5	-2.66	-2.62	1.62	0.17	0.05	1.6	
A3_I1	-249.62	-177.25	-224.85	-90.01	-152.52	-22.05	-67.94	-7.11	-2.68	-4.39	-0.01	-5.31	-2.48	-2.62	1.61	0.17	0.03	1.6	
A3_I2	-251.34	-178.57	-224.38	-90.11	-151.79	-22.08	-67.96	-9.53	-4.71	-4.64	-0.08	-7.03	-3.8	-2.15	1.51	0.9	0	1.58	
A4_I3	-250.28	-178.28	-224.49	-90.06	-152.54	-22.07	-67.97	-7.7	-3.67	-3.98	-0.02	-5.97	-3.51	-2.26	1.56	0.15	0.01	1.57	
A4_I4	-249.49	-177.56	-224.59	-89.99	-152.63	-22.04	-67.96	-6.85	-2.88	-4	0.01	-5.18	-2.79	-2.36	1.63	0.06	0.04	1.58	
A4_I1	-249.32	-177.4	-224.59	-90.01	-152.63	-22.05	-67.96	-6.68	-2.71	-4	0	-5.01	-2.63	-2.36	1.61	0.06	0.03	1.58	
A4_I2	-250.62	-178.67	-224.21	-90.04	-152.28	-22.08	-67.97	-8.3	-4.32	-3.97	0.01	-6.31	-3.9	-1.98	1.58	0.41	0	1.57	
I1_A4	-249.79	-178.05	-224.38	-90.02	-152.63	-22.06	-67.96	-7.16	-3.37	-3.8	-0.01	-5.48	-3.28	-2.15	1.6	0.06	0.02	1.58	
I1_A3	-249.93	-178.19	-224.38	-89.99	-152.62	-22.03	-67.96	-7.32	-3.54	-3.8	-0.01	-5.62	-3.42	-2.15	1.63	0.07	0.05	1.58	
I1_A2	-250	-178.26	-224.37	-90.01	-152.62	-22.06	-67.96	-7.37	-3.58	-3.79	0	-5.69	-3.49	-2.14	1.61	0.07	0.02	1.58	
I1_A1	-249.79	-178.05	-224.38	-90.02	-152.62	-22.06	-67.96	-7.16	-3.37	-3.8	-0.01	-5.48	-3.28	-2.15	1.6	0.07	0.02	1.58	
I1_A2/7	-250.3	-178.65	-224.29	-89.91	-152.54	-22.02	-67.96	-7.79	-4.1	-3.8	0.06	-5.99	-3.88	-2.06	1.71	0.15	0.06	1.58	
I1_A3/6	-250.22	-178.57	-224.26	-89.91	-152.53	-22.01	-67.96	-7.73	-4.04	-3.78	0.05	-5.91	-3.8	-2.03	1.71	0.16	0.07	1.58	
I2_A4	-250.95	-177.14	-225.49	-90.08	-151.76	-22.05	-67.97	-9.17	-3.33	-5.76	-0.06	-6.64	-2.37	-3.26	1.54	0.93	0.03	1.57	
I2_A3	-251.02	-177.3	-225.47	-89.93	-151.69	-22.01	-67.97	-9.35	-3.6	-5.81	0.05	-6.71	-2.53	-3.24	1.69	1	0.07	1.57	
I2_A2	-250.95	-177.31	-225.48	-89.91	-151.73	-22.05	-67.97	-9.21	-3.53	-5.79	0.11	-6.64	-2.54	-3.25	1.71	0.96	0.03	1.57	
I2_A1	-250.95	-177.14	-225.49	-90.08	-151.76	-22.05	-67.97	-9.17	-3.33	-5.76	-0.06	-6.64	-2.37	-3.26	1.54	0.93	0.03	1.57	
I2_A2/7	-251.35	-177.64	-225.39	-90.12	-151.78	-22.03	-67.98	-9.57	-3.84	-5.64	-0.12	-7.04	-2.87	-3.16	1.5	0.91	0.05	1.56	
I2_A3/6	-251.08	-177.45	-225.35	-89.99	-151.71	-22.02	-67.98	-9.37	-3.72	-5.66	0.01	-6.77	-2.68	-3.12	1.63	0.98	0.06	1.56	
I3_A4	-249.94	-177.76	-224.51	-89.97	-152.34	-22.05	-67.92	-7.63	-3.37	-4.25	0	-5.63	-2.99	-2.28	1.65	0.35	0.03	1.62	
I3_A3	-250.07	-177.91	-224.51	-89.94	-152.34	-22.02	-67.93	-7.78	-3.55	-4.24	0	-5.76	-3.14	-2.28	1.68	0.35	0.06	1.61	
I3_A2	-250.13	-178	-224.5	-90.01	-152.38	-22.05	-67.93	-7.77	-3.57	-4.19	-0.02	-5.82	-3.23	-2.27	1.61	0.31	0.03	1.61	
I3_A1	-249.94	-177.76	-224.51	-89.97	-152.34	-22.05	-67.92	-7.63	-3.37	-4.25	0	-5.63	-2.99	-2.28	1.65	0.35	0.03	1.62	
I3_A2/7	-250.54	-178.39	-224.41	-89.95	-152.28	-22	-67.92	-8.33	-4.11	-4.21	-0.02	-6.23	-3.62	-2.18	1.67	0.41	0.08	1.62	
I3_A3/6	-250.32	-178.2	-224.31	-89.93	-152.19	-21.99	-67.93	-8.22	-4.02	-4.2	-0.01	-6.01	-3.43	-2.08	1.69	0.5	0.09	1.61	
I4_A4	-249.78	-178.06	-224.39	-89.98	-152.64	-22.06	-67.95	-7.14	-3.37	-3.81	0.02	-5.47	-3.29	-2.16	1.64	0.05	0.02	1.59	
I4_A3	-249.98	-178.2	-224.38	-90.03	-152.64	-22.02	-67.95	-7.37	-3.54	-3.8	-0.06	-5.67	-3.43	-2.15	1.59	0.05	0.06	1.59	
I4_A2	-250.07	-178.27	-224.38	-90.05	-152.63	-22.05	-67.95	-7.43	-3.59	-3.8	-0.05	-5.76	-3.5	-2.15	1.57	0.06	0.03	1.59	
I4_A1	-249.78	-178.06	-224.39	-89.98	-152.63	-22.06	-67.95	-7.14	-3.37	-3.81	0.02	-5.47	-3.29	-2.16	1.64	0.06	0.02	1.59	
I4_A2/7	-250.3	-178.66	-224.3	-89.87	-152.54	-22.01	-67.95	-7.8	-4.11	-3.81	0.09	-5.99	-3.89	-2.07	1.75	0.15	0.07	1.59	
I4_A3/6	-250.17	-178.46	-224.2	-89.96	-152.44	-21.99	-67.95	-7.79	-4.02	-3.81	-0.02	-5.86	-3.69	-1.97	1.66	0.25	0.09	1.59	

Abb. C35 : N-Benzoyl-valinmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

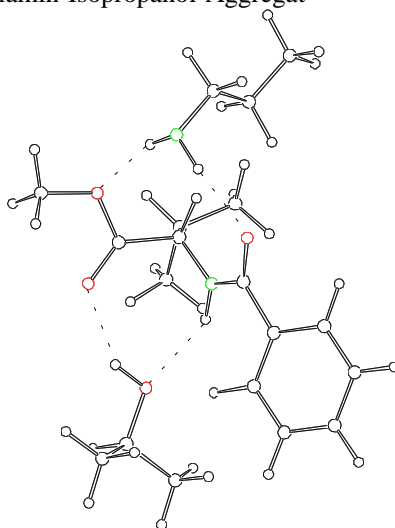


Tabelle C35 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-209.45	-137.46	-183.42	-90.04	-111.42	-22.08	-67.97	-7.98	-3.96	-4.03	0.01	-6.16	-3.71	-2.21	1.58	-0.25	0	-1.57
A1_I4	-208.57	-136.6	-183.61	-90.02	-111.62	-22.06	-67.96	-6.92	-2.92	-4.03	0	-5.28	-2.85	-2.4	1.6	-0.05	-0.02	-1.58
A1_I1	-208.42	-136.46	-183.6	-90.01	-111.63	-22.05	-67.96	-6.78	-2.78	-4.02	0	-5.13	-2.71	-2.39	1.61	-0.04	-0.03	-1.58
A1_I2	-208.64	-136.71	-183.6	-89.92	-111.61	-22	-67.96	-7.06	-3.1	-4.03	0.04	-5.35	-2.96	-2.39	1.7	-0.06	-0.08	-1.58
A2_I3	-210.54	-137.42	-184.45	-90.07	-111.41	-22.07	-67.97	-9.09	-3.94	-5.07	-0.02	-7.25	-3.67	-3.24	1.55	-0.26	-0.01	-1.57
A2_I4	-209.62	-136.56	-184.61	-90.05	-111.58	-22.06	-67.96	-8.02	-2.92	-5.07	-0.03	-6.33	-2.81	-3.4	1.57	-0.09	-0.02	-1.58
A2_I1	-209.45	-136.41	-184.62	-90.03	-111.58	-22.05	-67.96	-7.85	-2.77	-5.07	-0.01	-6.16	-2.66	-3.41	1.59	-0.09	-0.03	-1.58
A2_I2	-209.68	-136.67	-184.61	-89.94	-111.56	-22	-67.96	-8.15	-3.11	-5.08	0.03	-6.39	-2.92	-3.4	1.68	-0.11	-0.08	-1.58
A3_I3	-209.91	-137.41	-183.79	-90.12	-111.43	-22.07	-67.99	-8.42	-3.91	-4.38	-0.06	-6.62	-3.66	-2.58	1.5	-0.24	-0.01	-1.55
A3_I4	-208.95	-136.56	-183.97	-90.05	-111.58	-22.06	-67.99	-7.32	-2.92	-4.4	0	-5.66	-2.81	-2.76	1.57	-0.09	-0.02	-1.55
A3_I1	-208.79	-136.42	-183.97	-90.02	-111.58	-22.05	-67.99	-7.17	-2.78	-4.4	0.02	-5.5	-2.67	-2.76	1.6	-0.09	-0.03	-1.55
A3_I2	-209.08	-136.67	-183.95	-90.01	-111.57	-22	-67.99	-7.52	-3.1	-4.4	-0.02	-5.79	-2.92	-2.74	1.61	-0.1	-0.08	-1.55
A4_I3	-209.63	-137.39	-183.65	-90.02	-111.4	-22.08	-67.97	-8.18	-3.91	-4.28	0.02	-6.34	-3.64	-2.44	1.6	-0.27	0	-1.57
A4_I4	-208.78	-136.55	-183.81	-90.03	-111.57	-22.06	-67.97	-7.19	-2.92	-4.28	0	-5.49	-2.8	-2.6	1.59	-0.1	-0.02	-1.57
A4_I1	-208.63	-136.4	-183.82	-90.02	-111.57	-22.05	-67.97	-7.04	-2.78	-4.28	0	-5.34	-2.65	-2.61	1.6	-0.1	-0.03	-1.57
A4_I2	-208.88	-136.67	-183.81	-89.95	-111.54	-22.01	-67.97	-7.35	-3.11	-4.3	0.03	-5.59	-2.92	-2.6	1.67	-0.13	-0.07	-1.57
I1_A4	-208.66	-136.85	-183.43	-89.88	-111.58	-21.95	-67.96	-7.18	-3.33	-3.9	0.02	-5.37	-3.1	-2.22	1.74	-0.09	-0.13	-1.58
I1_A3	-208.77	-136.98	-183.42	-89.94	-111.58	-22.02	-67.96	-7.22	-3.38	-3.88	0.03	-5.48	-3.23	-2.21	1.68	-0.09	-0.06	-1.58
I1_A2	-208.8	-137	-183.43	-89.97	-111.59	-22.06	-67.96	-7.19	-3.35	-3.88	0.04	-5.51	-3.25	-2.22	1.65	-0.08	-0.02	-1.58
I1_A1	-208.85	-137.03	-183.45	-90	-111.61	-22.05	-67.96	-7.24	-3.37	-3.89	0.01	-5.56	-3.28	-2.24	1.62	-0.06	-0.03	-1.58
I1_A2/7	-208.88	-137.14	-183.23	-89.94	-111.4	-22.03	-67.96	-7.49	-3.71	-3.88	0.05	-5.59	-3.39	-2.02	1.68	-0.27	-0.05	-1.58
I1_A3/6	-208.55	-136.81	-183.1	-89.91	-111.25	-22.03	-67.96	-7.32	-3.53	-3.89	0.07	-5.26	-3.06	-1.89	1.71	-0.42	-0.05	-1.58
I2_A4	-211.33	-136.45	-185.92	-89.93	-111.1	-21.95	-67.94	-10.33	-3.39	-6.88	-0.04	-8.04	-2.7	-4.71	1.69	-0.57	-0.13	-1.6
I2_A3	-211.43	-136.54	-185.92	-89.96	-111.08	-22.02	-67.94	-10.39	-3.44	-6.9	0	-8.14	-2.79	-4.71	1.66	-0.59	-0.06	-1.6
I2_A2	-211.33	-136.49	-185.88	-90	-111.13	-22.05	-67.93	-10.22	-3.31	-6.83	-0.02	-8.04	-2.74	-4.67	1.62	-0.54	-0.03	-1.61
I2_A1	-211.52	-136.73	-186.05	-90.08	-111.3	-22.05	-68.02	-10.15	-3.38	-6.73	-0.01	-8.23	-2.98	-4.84	1.54	-0.37	-0.03	-1.52
I2_A2/7	<b>-211.89</b>	<b>-136.96</b>	<b>-185.93</b>	<b>-90.13</b>	<b>-111.12</b>	<b>-22.02</b>	<b>-68.02</b>	<b>-10.73</b>	<b>-3.82</b>	<b>-6.79</b>	<b>-0.09</b>	<b>-8.6</b>	<b>-3.21</b>	<b>-4.72</b>	<b>1.49</b>	<b>-0.55</b>	<b>-0.06</b>	<b>-1.52</b>
I2_A3/6	-211.55	-136.66	-185.76	-90.08	-110.92	-22.03	-68.02	-10.59	-3.72	-6.82	-0.03	-8.26	-2.91	-4.55	1.54	-0.75	-0.05	-1.52
I3_A4	-211.36	-136.62	-185.9	-90.02	-111.27	-21.95	-68	-10.14	-3.4	-6.63	-0.07	-8.07	-2.87	-4.69	1.6	-0.4	-0.13	-1.54
I3_A3	-211.46	-136.74	-185.9	-90.06	-111.29	-22.02	-68	-10.16	-3.44	-6.61	-0.04	-8.17	-2.99	-4.69	1.56	-0.38	-0.06	-1.54
I3_A2	-211.36	-136.69	-185.87	-90.12	-111.32	-22.05	-68.01	-9.98	-3.32	-6.54	-0.06	-8.07	-2.94	-4.66	1.5	-0.35	-0.03	-1.53
I3_A1	-211.38	-136.75	-185.91	-90.07	-111.32	-22.05	-68	-10.01	-3.38	-6.59	-0.02	-8.09	-3	-4.7	1.55	-0.35	-0.03	-1.54
I3_A2/7	-211.79	-136.96	-185.78	-90.11	-111.07	-22.02	-68	-10.7	-3.87	-6.71	-0.09	-8.5	-3.21	-4.57	1.51	-0.6	-0.06	-1.54
I3_A3/6	-211.47	-136.64	-185.61	-90.1	-110.88	-22.02	-68	-10.57	-3.74	-6.73	-0.07	-8.18	-2.89	-4.4	1.52	-0.79	-0.06	-1.54
I4_A4	-208.66	-136.87	-183.44	-89.9	-111.6	-21.95	-67.97	-7.15	-3.32	-3.87	0.01	-5.37	-3.12	-2.23	1.72	-0.07	-0.13	-1.57
I4_A3	-208.86	-137.03	-183.44	-89.96	-111.61	-21.97	-67.97	-7.31	-3.46	-3.86	-0.02	-5.57	-3.28	-2.23	1.66	-0.06	-0.11	-1.57
I4_A2	-208.85	-137.01	-183.44	-90.02	-111.6	-22.05	-67.97	-7.23	-3.36	-3.87	0	-5.56	-3.26	-2.23	1.6	-0.07	-0.03	-1.57
I4_A1	-208.86	-137.05	-183.45	-90.02	-111.62	-22.05	-67.97	-7.22	-3.37	-3.86	0	-5.57	-3.3	-2.24	1.6	-0.05	-0.03	-1.57
I4_A2/7	-208.8	-137.14	-183.24	-89.92	-111.44	-22.03	-67.99	-7.34	-3.67	-3.81	0.1	-5.51	-3.39	-2.03	1.7	-0.23	-0.05	-1.55
I4_A3/6	-208.55	-136.81	-183.1	-89.99	-111.3	-22.02	-67.98	-7.25	-3.49	-3.82	0.02	-5.26	-3.06	-1.89	1.63	-0.37	-0.06	-1.56

Abb. C36 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregat

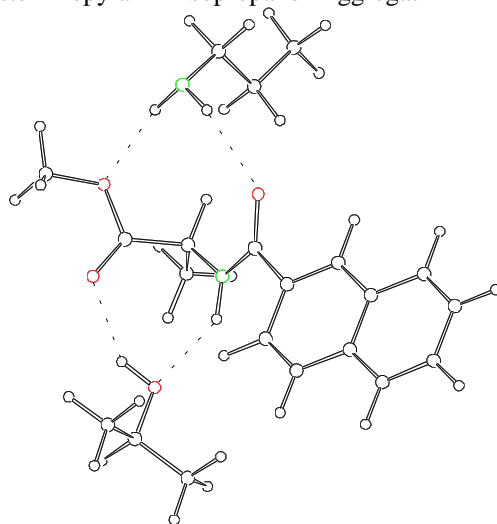


Tabelle C36 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylester-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H/(kcal/mol)							W <sub>A</sub> /(kcal/mol)				W <sub>M</sub> /(kcal/mol)						
	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	Gesamt	As Pa	As Al	Pa Al	As	Pa	Al
A1_I3	-180.38	-108.23	-154.14	-89.97	-81.94	-22.06	-67.96	-8.42	-4.23	-4.24	0.04	-6.46	-3.85	-2.3	1.65	0.36	0.02	1.58
A1_I4	-179.17	-107.05	-154.38	-90.01	-82.24	-22.05	-67.95	-6.91	-2.75	-4.18	0	-5.25	-2.67	-2.54	1.61	0.06	0.03	1.59
A1_I1	-179.18	-107.07	-154.37	-90.01	-82.25	-22.05	-67.95	-6.93	-2.77	-4.17	0	-5.26	-2.69	-2.53	1.61	0.05	0.03	1.59
A1_I2	-179.59	-107.47	-154.27	-89.91	-82.11	-21.99	-67.95	-7.54	-3.37	-4.2	0.03	-5.67	-3.09	-2.43	1.71	0.19	0.09	1.59
A2_I3	-180.31	-107.84	-154.3	-90.05	-81.9	-22.08	-67.97	-8.37	-3.87	-4.43	0	-6.39	-3.46	-2.46	1.57	0.4	0	1.57
A2_I4	-179.38	-107	-154.55	-90.04	-82.2	-22.05	-67.95	-7.17	-2.75	-4.4	-0.03	-5.46	-2.62	-2.71	1.58	0.1	0.03	1.59
A2_I1	-179.39	-107.02	-154.55	-90.02	-82.2	-22.05	-67.95	-7.18	-2.77	-4.4	-0.01	-5.47	-2.64	-2.71	1.6	0.1	0.03	1.59
A2_I2	-179.82	-107.44	-154.46	-89.89	-82.04	-22	-67.96	-7.82	-3.41	-4.46	0.07	-5.9	-3.06	-2.62	1.73	0.26	0.08	1.58
A3_I3	-179.92	-108.19	-153.49	-90.05	-81.87	-22.05	-67.95	-8.05	-4.27	-3.67	-0.05	-6	-3.81	-1.65	1.57	0.43	0.03	1.59
A3_I4	-178.66	-106.81	-153.87	-89.99	-82.03	-22.05	-67.95	-6.63	-2.73	-3.89	0.01	-4.74	-2.43	-2.03	1.63	0.27	0.03	1.59
A3_I1	-178.7	-106.82	-153.86	-90.02	-82.02	-22.05	-67.95	-6.67	-2.75	-3.89	-0.02	-4.78	-2.44	-2.02	1.6	0.28	0.03	1.59
A3_I2	-178.99	-107.42	-153.63	-90.01	-82.13	-22	-67.97	-6.9	-3.3	-3.53	-0.04	-5.07	-3.04	-1.79	1.61	0.17	0.08	1.57
A4_I3	-180.1	-107.87	-154.13	-90.03	-81.9	-22.08	-67.96	-8.16	-3.89	-4.27	0	-6.18	-3.49	-2.29	1.59	0.4	0	1.58
A4_I4	-179.22	-107.05	-154.43	-90.01	-82.25	-22.05	-67.95	-6.97	-2.75	-4.23	0	-5.3	-2.67	-2.59	1.61	0.05	0.03	1.59
A4_I1	-179.24	-107.07	-154.43	-90.01	-82.25	-22.05	-67.95	-6.99	-2.77	-4.23	0	-5.32	-2.69	-2.59	1.61	0.05	0.03	1.59
A4_I2	-179.68	-107.47	-154.32	-89.93	-82.1	-21.99	-67.95	-7.63	-3.38	-4.26	0.01	-5.76	-3.09	-2.48	1.69	0.2	0.09	1.59
I1_A4	-179.58	-107.76	-154.06	-90	-82.23	-22.05	-67.95	-7.34	-3.48	-3.88	0.01	-5.66	-3.38	-2.22	1.62	0.07	0.03	1.59
I1_A3	-179.28	-107.5	-154	-89.95	-82.17	-22.02	-67.96	-7.14	-3.31	-3.88	0.03	-5.36	-3.12	-2.16	1.67	0.13	0.06	1.58
I1_A2	-179.24	-107.45	-154.06	-89.97	-82.22	-22.06	-67.96	-7.01	-3.17	-3.88	0.04	-5.32	-3.07	-2.22	1.65	0.08	0.02	1.58
I1_A1	-179.58	-107.76	-154.06	-90	-82.23	-22.05	-67.95	-7.34	-3.48	-3.88	0.01	-5.66	-3.38	-2.22	1.62	0.07	0.03	1.59
I1_A2/7	-179.24	-107.45	-154.06	-89.97	-82.22	-22.06	-67.96	-7.01	-3.17	-3.88	0.04	-5.32	-3.07	-2.22	1.65	0.08	0.02	1.58
I1_A3/6	-179.28	-107.54	-153.78	-89.94	-81.93	-22.03	-67.96	-7.37	-3.58	-3.89	0.05	-5.36	-3.16	-1.94	1.68	0.37	0.05	1.58
I2_A4	-181.94	-107.43	-156.36	-90.09	-81.87	-22.05	-68.02	-9.99	-3.51	-6.47	-0.02	-8.02	-3.05	-4.52	1.53	0.43	0.03	1.52
I2_A3	-181.8	-107.23	-156.34	-90.04	-81.82	-22.02	-68.02	-9.94	-3.39	-6.5	0	-7.88	-2.85	-4.5	1.58	0.48	0.06	1.52
I2_A2	-181.64	-107.09	-156.35	-90.08	-81.88	-22.05	-68.02	-9.69	-3.16	-6.45	-0.01	-7.72	-2.71	-4.51	1.54	0.42	0.03	1.52
I2_A1	-181.94	-107.43	-156.36	-90.09	-81.87	-22.05	-68.02	-9.99	-3.51	-6.47	-0.02	-8.02	-3.05	-4.52	1.53	0.43	0.03	1.52
I2_A2/7	-181.64	-107.09	-156.35	-90.08	-81.88	-22.05	-68.02	-9.69	-3.16	-6.45	-0.01	-7.72	-2.71	-4.51	1.54	0.42	0.03	1.52
I2_A3/6	-182.08	-107.33	-156.16	-90.12	-81.53	-22.01	-68.02	-10.52	-3.79	-6.61	-0.09	-8.16	-2.95	-4.32	1.5	0.77	0.07	1.52
I3_A4	-182	-107.44	-156.45	-89.95	-81.88	-22.05	-67.9	-10.17	-3.51	-6.67	0	-8.08	-3.06	-4.61	1.67	0.42	0.03	1.64
I3_A3	-181.93	-107.24	-156.43	-89.93	-81.83	-22.02	-67.87	-10.21	-3.39	-6.73	-0.04	-8.01	-2.86	-4.59	1.69	0.47	0.06	1.67
I3_A2	-181.78	-107.09	-156.43	-89.99	-81.87	-22.05	-67.87	-9.98	-3.17	-6.69	-0.06	-7.86	-2.71	-4.59	1.63	0.43	0.03	1.67
I3_A1	-182	-107.44	-156.45	-89.95	-81.88	-22.05	-67.9	-10.17	-3.51	-6.67	0	-8.08	-3.06	-4.61	1.67	0.42	0.03	1.64
I3_A2/7	-181.78	-107.09	-156.43	-89.99	-81.87	-22.05	-67.87	-9.98	-3.17	-6.69	-0.06	-7.86	-2.71	-4.59	1.63	0.43	0.03	1.67
<b>I3_A3/6</b>	<b>-182.16</b>	<b>-107.36</b>	<b>-156.26</b>	<b>-89.93</b>	<b>-81.55</b>	<b>-22.01</b>	<b>-67.86</b>	<b>-10.74</b>	<b>-3.8</b>	<b>-6.86</b>	<b>-0.06</b>	<b>-8.24</b>	<b>-2.98</b>	<b>-4.42</b>	<b>1.69</b>	<b>0.75</b>	<b>0.07</b>	<b>1.68</b>
I4_A4	-178.99	-107.27	-153.99	-89.91	-82.23	-21.97	-67.96	-6.83	-3.07	-3.8	0.01	-5.07	-2.89	-2.15	1.71	0.07	0.11	1.58
I4_A3	-179.26	-107.5	-153.91	-90.01	-82.16	-22.02	-67.96	-7.12	-3.32	-3.79	-0.03	-5.34	-3.12	-2.07	1.61	0.14	0.06	1.58
I4_A2	-179.2	-107.45	-153.98	-90.01	-82.23	-22.06	-67.96	-6.96	-3.17	-3.79	0	-5.28	-3.07	-2.14	1.61	0.07	0.02	1.58
I4_A1	-179.52	-107.77	-153.99	-90.02	-82.23	-22.05	-67.96	-7.27	-3.48	-3.8	-0.01	-5.6	-3.39	-2.15	1.6	0.07	0.03	1.58
I4_A2/7	-179.2	-107.45	-153.98	-90.02	-82.23	-22.06	-67.96	-6.96	-3.17	-3.79	0	-5.28	-3.07	-2.14	1.6	0.07	0.02	1.58
I4_A3/6	-179.13	-107.53	-153.68	-89.87	-81.93	-22.03	-67.96	-7.21	-3.57	-3.79	0.12	-5.21	-3.15	-1.84	1.75	0.37	0.05	1.58

Abbildung C37 :

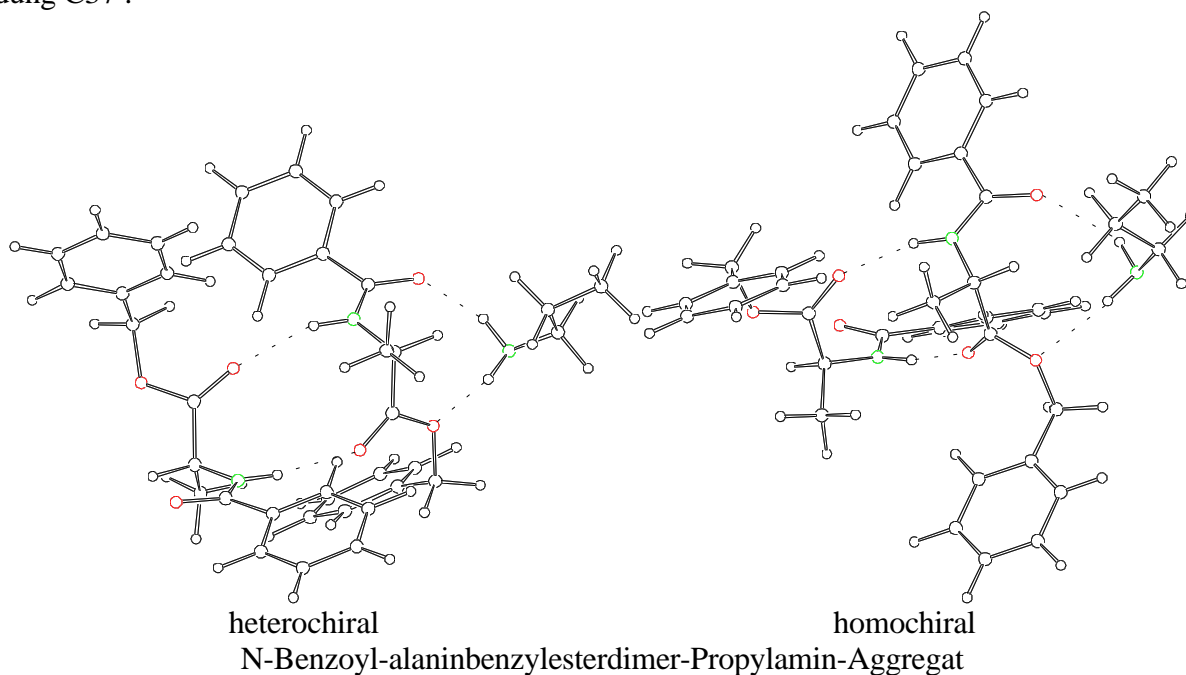


Tabelle C37 : Energien des N-Benzoyl-alaninebenzylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bbsr_Pa_A2/7	-176,45	-150,04	-94,00	-97,14	-71,84	-70,85	-22,05
<b>bbsr_Pa_A3/6</b>	<b>-176,70</b>	<b>-150,07</b>	<b>-93,89</b>	<b>-97,44</b>	<b>-71,85</b>	<b>-70,92</b>	<b>-21,98</b>
bbss_Pa_A2/7	-177,52	-151,48	-94,25	-97,18	-71,91	-71,77	-22,02
<b>bbss_Pa_A3/6</b>	<b>-177,72</b>	<b>-151,53</b>	<b>-94,03</b>	<b>-97,66</b>	<b>-71,89</b>	<b>-71,87</b>	<b>-22,00</b>

Fortsetzung Tabelle C37

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
bbsr_Pa_A2/7	-11,70	-7,35	-0,10	-4,24
<b>bbsr_Pa_A3/6</b>	<b>-11,95</b>	<b>-7,30</b>	<b>-0,06</b>	<b>-4,55</b>
bbss_Pa_A2/7	-11,82	-7,79	-0,31	-3,39
<b>bbss_Pa_A3/6</b>	<b>-11,96</b>	<b>-7,77</b>	<b>-0,14</b>	<b>-3,78</b>

Fortsetzung Tabelle C37

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bbsr_Pa_A2/7	-8,81	-4,48	0,86	-2,28	0,94	1,93	0,03
<b>bbsr_Pa_A3/6</b>	<b>-9,06</b>	<b>-4,51</b>	<b>0,97</b>	<b>-2,58</b>	<b>0,93</b>	<b>1,86</b>	<b>0,10</b>
bbss_Pa_A2/7	-9,88	-5,92	0,61	-2,32	0,87	1,01	0,06
<b>bbss_Pa_A3/6</b>	<b>-10,08</b>	<b>-5,97</b>	<b>0,83</b>	<b>-2,80</b>	<b>0,89</b>	<b>0,91</b>	<b>0,08</b>

Abbildung C38 :

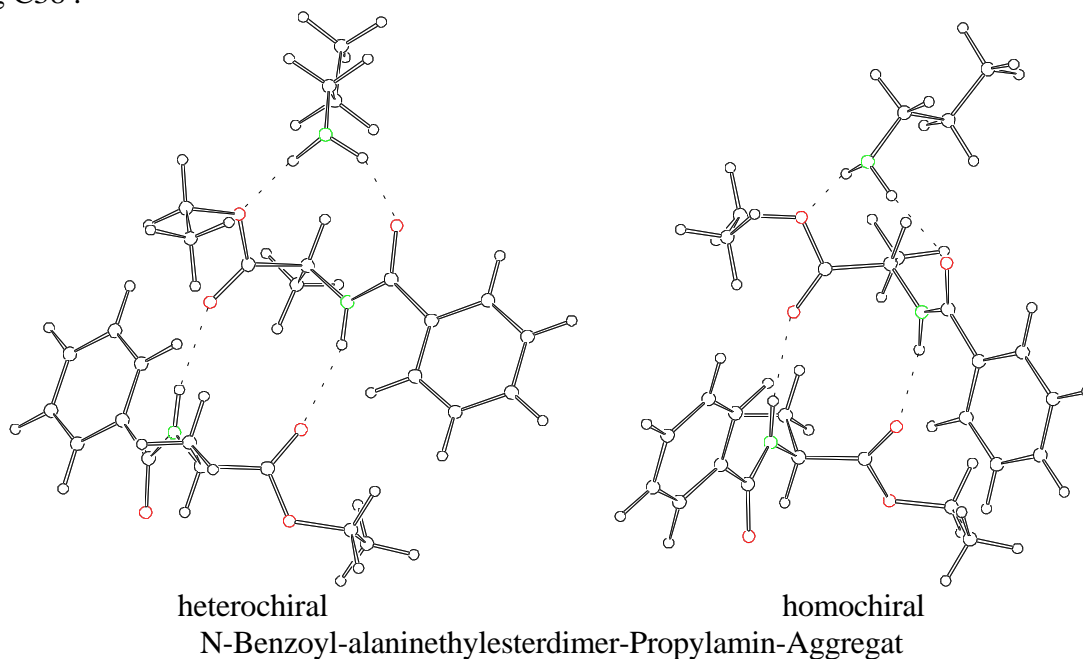


Tabelle C38 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
besr_Pa_A2/7	-245,56	-219,32	-128,35	-131,68	-106,27	-105,52	-22,01
<b>besr_Pa_A3/6</b>	<b>-245,66</b>	<b>-219,28</b>	<b>-128,19</b>	<b>-131,55</b>	<b>-106,13</b>	<b>-105,30</b>	<b>-22,00</b>
bess_Pa_A2/7	-246,40	-220,27	-128,07	-131,68	-106,07	-105,71	-22,01
<b>bess_Pa_A3/6</b>	<b>-246,60</b>	<b>-220,36</b>	<b>-128,20</b>	<b>-131,84</b>	<b>-106,07</b>	<b>-105,87</b>	<b>-21,99</b>

Fortsetzung Tabelle C38

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
besr_Pa_A2/7	-11,76	-7,53	-0,07	-4,14
<b>besr_Pa_A3/6</b>	<b>-12,23</b>	<b>-7,85</b>	<b>-0,07</b>	<b>-4,25</b>
bess_Pa_A2/7	-12,61	-8,49	0,01	-3,96
<b>bess_Pa_A3/6</b>	<b>-12,66</b>	<b>-8,42</b>	<b>-0,13</b>	<b>-3,97</b>

Fortsetzung Tabelle C38

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
besr_Pa_A2/7	-9,66	-5,50	0,64	-2,69	0,64	1,39	0,07
<b>besr_Pa_A3/6</b>	<b>-9,76</b>	<b>-5,46</b>	<b>0,80</b>	<b>-2,56</b>	<b>0,78</b>	<b>1,61</b>	<b>0,08</b>
bess_Pa_A2/7	-10,50	-6,45	0,92	-2,69	0,84	1,20	0,07
<b>bess_Pa_A3/6</b>	<b>-10,70</b>	<b>-6,54</b>	<b>0,79</b>	<b>-2,85</b>	<b>0,84</b>	<b>1,04</b>	<b>0,09</b>



Abbildung C39 :

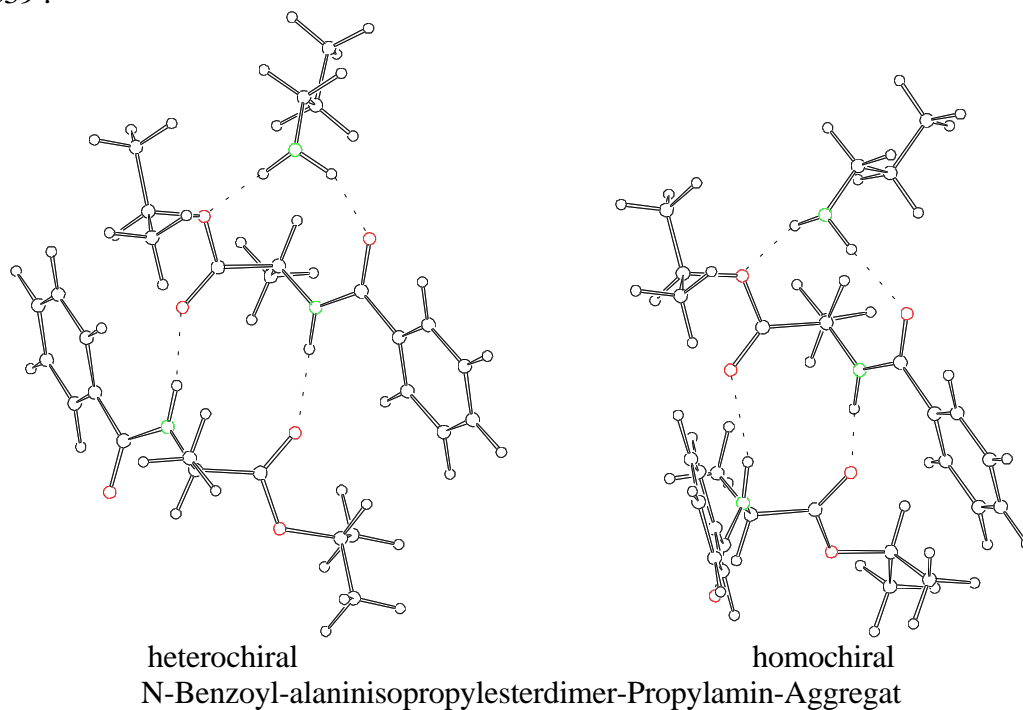


Tabelle C39 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bisr_Pa_A2/7	-254,33	-227,71	-131,97	-135,65	-109,90	-109,10	-22,02
<b>bisr_Pa_A3/6</b>	<b>-254,34</b>	<b>-227,85</b>	<b>-131,94</b>	<b>-135,82</b>	<b>-109,88</b>	<b>-109,49</b>	<b>-21,99</b>
biss_Pa_A2/7	-254,90	-228,74	-131,93	-135,76	-109,90	-109,71	-22,03
<b>biss_Pa_A3/6</b>	<b>-255,09</b>	<b>-228,80</b>	<b>-132,08</b>	<b>-135,83</b>	<b>-109,90</b>	<b>-109,74</b>	<b>-22,03</b>

Fortsetzung Tabelle C39

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
bisr_Pa_A2/7	-13,30	-8,71	-0,04	-4,53
<b>bisr_Pa_A3/6</b>	<b>-12,97</b>	<b>-8,48</b>	<b>-0,07</b>	<b>-4,34</b>
biss_Pa_A2/7	-13,26	-9,13	0,00	-4,03
<b>biss_Pa_A3/6</b>	<b>-13,42</b>	<b>-9,16</b>	<b>-0,14</b>	<b>-4,06</b>

Fortsetzung Tabelle C39

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bisr_Pa_A2/7	-10,51	-5,97	0,98	-2,70	0,97	1,77	0,06
<b>bisr_Pa_A3/6</b>	<b>-10,52</b>	<b>-6,11</b>	<b>1,01</b>	<b>-2,87</b>	<b>0,99</b>	<b>1,38</b>	<b>0,09</b>
biss_Pa_A2/7	-11,08	-7,00	1,02	-2,81	0,97	1,16	0,05
<b>biss_Pa_A3/6</b>	<b>-11,27</b>	<b>-7,06</b>	<b>0,87</b>	<b>-2,88</b>	<b>0,97</b>	<b>1,13</b>	<b>0,05</b>

Abbildung C40 :

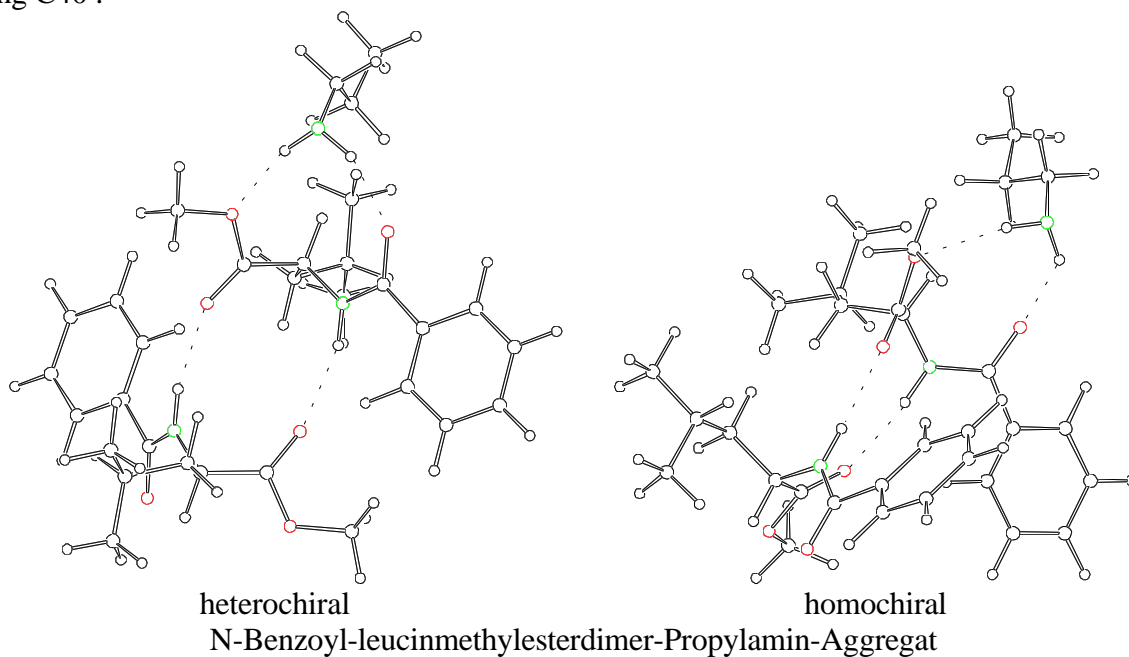


Tabelle C40 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
blsr_Pa_A2/7	-268,20	-242,03	-139,67	-142,83	-117,62	-116,75	-22,01
<b>blsr_Pa_A3/6</b>	<b>-268,65</b>	<b>-242,06</b>	<b>-139,66</b>	<b>-143,22</b>	<b>-117,61</b>	<b>-116,74</b>	<b>-21,98</b>
blss_Pa_A2/7	-268,52	-242,57	-139,67	-142,99	-117,66	-117,07	-22,02
<b>blss_Pa_A3/6</b>	<b>-268,96</b>	<b>-242,69</b>	<b>-139,75</b>	<b>-143,38</b>	<b>-117,65</b>	<b>-117,23</b>	<b>-21,99</b>

Fortsetzung Tabelle C40

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
blsr_Pa_A2/7	-11,81	-7,66	-0,04	-4,07
<b>blsr_Pa_A3/6</b>	<b>-12,31</b>	<b>-7,71</b>	<b>-0,07</b>	<b>-4,49</b>
blss_Pa_A2/7	-11,77	-7,84	0,01	-3,90
<b>blss_Pa_A3/6</b>	<b>-12,09</b>	<b>-7,81</b>	<b>-0,11</b>	<b>-4,15</b>

Fortsetzung Tabelle C40

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
blsr_Pa_A2/7	-9,36	-5,27	0,79	-2,37	0,76	1,63	0,07
<b>blsr_Pa_A3/6</b>	<b>-9,81</b>	<b>-5,30</b>	<b>0,80</b>	<b>-2,76</b>	<b>0,77</b>	<b>1,64</b>	<b>0,10</b>
blss_Pa_A2/7	-9,68	-5,81	0,79	-2,53	0,72	1,31	0,06
<b>blss_Pa_A3/6</b>	<b>-10,12</b>	<b>-5,93</b>	<b>0,71</b>	<b>-2,92</b>	<b>0,73</b>	<b>1,15</b>	<b>0,09</b>

Abbildung C41 :

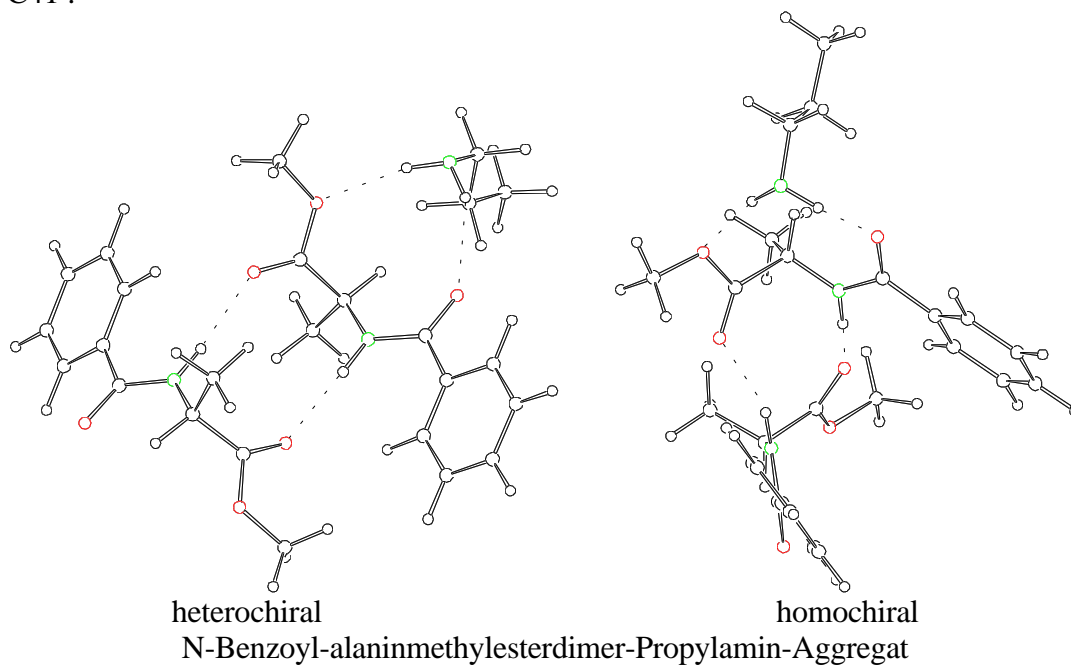


Tabelle C41 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bmsr_Pa_A2/7	-233,83	-207,94	-122,12	-125,33	-100,10	-99,46	-22,01	
<b>bmsr_Pa_A3/6</b>	<b>-234,11</b>	<b>-208,09</b>	<b>-122,20</b>	<b>-125,58</b>	<b>-100,11</b>	<b>-99,64</b>	<b>-22,01</b>	
bmss_Pa_A2/7	-234,07	-208,32	-122,08	-125,35	-100,08	-99,63	-22,02	
<b>bmss_Pa_A3/6</b>	<b>-234,48</b>	<b>-208,59</b>	<b>-122,20</b>	<b>-125,59</b>	<b>-100,04</b>	<b>-99,86</b>	<b>-22,02</b>	

Fortsetzung Tabelle C41

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
bmsr_Pa_A2/7	-12,25	-8,37	-0,01	-3,86
<b>bmsr_Pa_A3/6</b>	<b>-12,35</b>	<b>-8,34</b>	<b>-0,08</b>	<b>-3,93</b>
bmss_Pa_A2/7	-12,35	-8,61	0,02	-3,71
<b>bmss_Pa_A3/6</b>	<b>-12,55</b>	<b>-8,69</b>	<b>-0,14</b>	<b>-3,71</b>

Fortsetzung Tabelle C41

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bmsr_Pa_A2/7	-9,81	-6,00	0,93	-2,28	0,87	1,51	0,07	
<b>bmsr_Pa_A3/6</b>	<b>-10,09</b>	<b>-6,15</b>	<b>0,85</b>	<b>-2,53</b>	<b>0,86</b>	<b>1,33</b>	<b>0,07</b>	
bmss_Pa_A2/7	-10,05	-6,38	0,97	-2,30	0,89	1,34	0,06	
<b>bmss_Pa_A3/6</b>	<b>-10,46</b>	<b>-6,65</b>	<b>0,85</b>	<b>-2,54</b>	<b>0,93</b>	<b>1,11</b>	<b>0,06</b>	

Abbildung C42 :

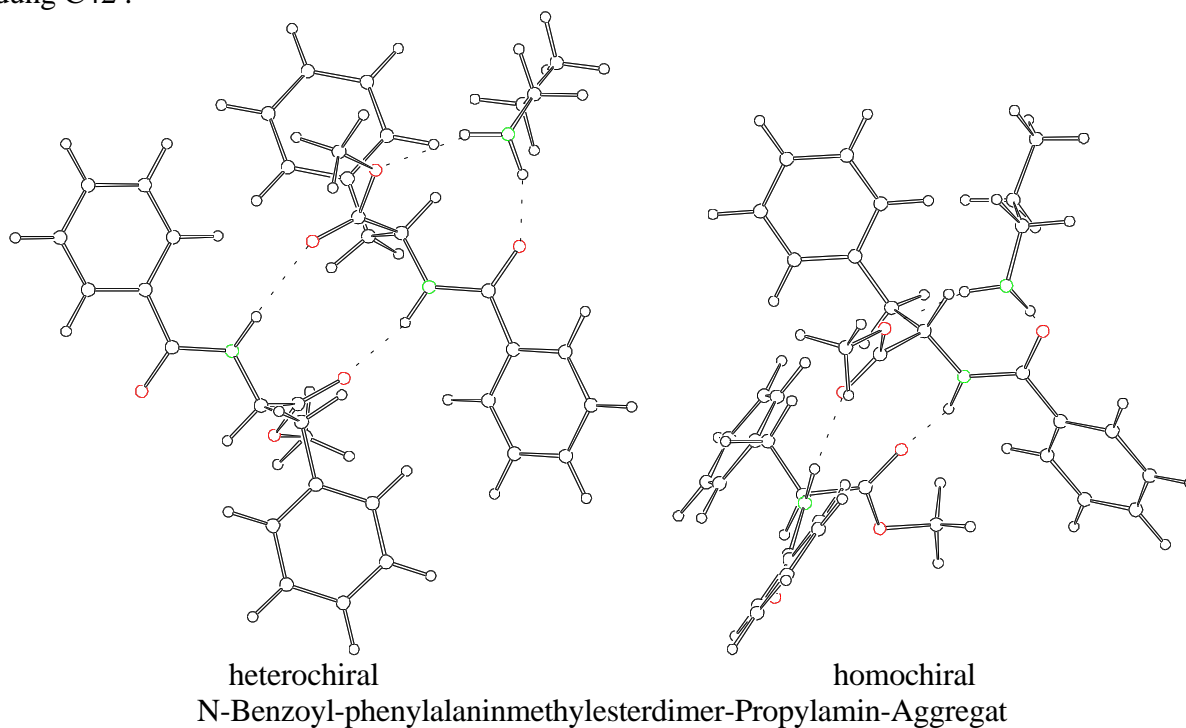


Tabelle C42 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bpsr_Pa_A2/7	-178,42	-152,61		-94,29	-97,69	-72,20	-71,96	-22,03
<b>bpsr_Pa_A3/6</b>	<b>-178,64</b>	<b>-152,64</b>		<b>-94,31</b>	<b>-97,92</b>	<b>-72,21</b>	<b>-71,99</b>	<b>-22,03</b>
bpss_Pa_A2/7	-178,50	-152,73		-94,16	-97,67	-72,09	-71,97	-22,03
<b>bpss_Pa_A3/6</b>	<b>-178,79</b>	<b>-152,76</b>		<b>-94,26</b>	<b>-97,91</b>	<b>-72,11</b>	<b>-71,99</b>	<b>-22,03</b>

Fortsetzung Tabelle C42

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
bpsr_Pa_A2/7	-12,24	-8,45	-0,07	-3,70
<b>bpsr_Pa_A3/6</b>	<b>-12,41</b>	<b>-8,44</b>	<b>-0,07</b>	<b>-3,90</b>
bpss_Pa_A2/7	-12,42	-8,68	-0,04	-3,67
<b>bpss_Pa_A3/6</b>	<b>-12,66</b>	<b>-8,66</b>	<b>-0,12</b>	<b>-3,89</b>

Fortsetzung Tabelle C42

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bpsr_Pa_A2/7	-9,26		-5,53	1,33	-2,07	1,34	1,58	0,05
<b>bpsr_Pa_A3/6</b>	<b>-9,48</b>		<b>-5,56</b>	<b>1,31</b>	<b>-2,30</b>	<b>1,33</b>	<b>1,55</b>	<b>0,05</b>
bpss_Pa_A2/7	-9,34		-5,65	1,46	-2,05	1,45	1,57	0,05
<b>bpss_Pa_A3/6</b>	<b>-9,63</b>		<b>-5,68</b>	<b>1,36</b>	<b>-2,29</b>	<b>1,43</b>	<b>1,55</b>	<b>0,05</b>

Abbildung C43 :

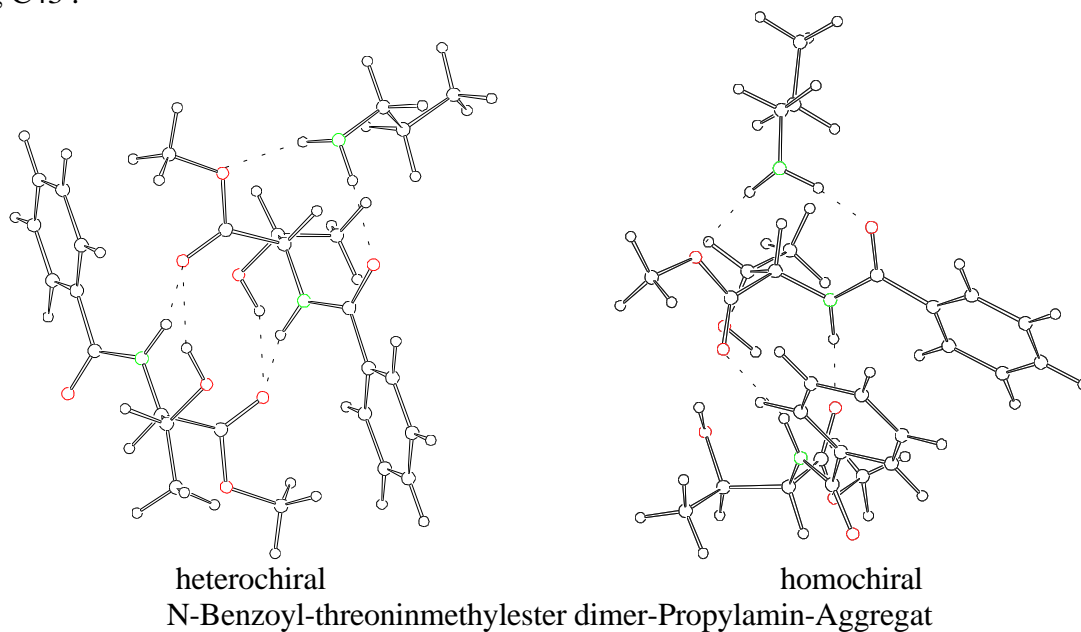


Tabelle C43 : Energien des N-Benzoyl-threoninemethylester dimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
btsr_Pa_A2/7	-339,99	-314,32		-172,03	-174,88	-149,93	-149,47	-22,02
<b>btsr_Pa_A3/6</b>	<b>-340,29</b>	<b>-314,56</b>		<b>-172,15</b>	<b>-175,36</b>	<b>-149,99</b>	<b>-149,76</b>	<b>-22,03</b>
btss_Pa_A2/7	-338,63	-313,14		-171,32	-174,02	-149,26	-148,66	-22,03
<b>btss_Pa_A3/6</b>	<b>-339,04</b>	<b>-313,31</b>		<b>-171,47</b>	<b>-174,27</b>	<b>-149,20</b>	<b>-148,78</b>	<b>-22,02</b>

Fortsetzung Tabelle C43

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
btsr_Pa_A2/7	-18,57	-14,91	-0,08	-3,39
<b>btsr_Pa_A3/6</b>	<b>-18,51</b>	<b>-14,81</b>	<b>-0,13</b>	<b>-3,57</b>
btss_Pa_A2/7	-18,69	-15,22	-0,03	-3,33
<b>btss_Pa_A3/6</b>	<b>-19,04</b>	<b>-15,33</b>	<b>-0,25</b>	<b>-3,47</b>

Fortsetzung Tabelle C43

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
btsr_Pa_A2/7	-12,53		-8,94	2,74	-0,11	2,76	3,22	0,06
<b>btsr_Pa_A3/6</b>	<b>-12,83</b>		<b>-9,18</b>	<b>2,62</b>	<b>-0,59</b>	<b>2,70</b>	<b>2,93</b>	<b>0,05</b>
btss_Pa_A2/7	-11,17		-7,76	3,45	0,75	3,43	4,03	0,05
<b>btss_Pa_A3/6</b>	<b>-11,58</b>		<b>-7,93</b>	<b>3,30</b>	<b>0,50</b>	<b>3,49</b>	<b>3,91</b>	<b>0,06</b>

Abbildung C44 :

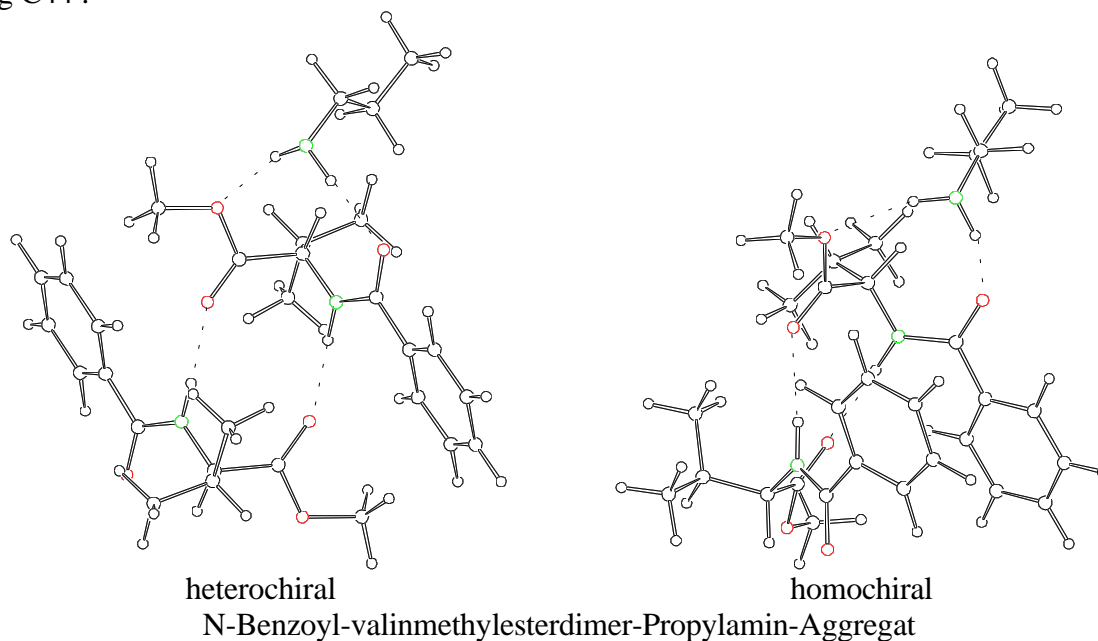


Tabelle C44 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylesterdimer-Propylamin-Aggregates

	H / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bvsr_Pa_A2/7	-255,19	-229,61	-133,06	-136,31	-111,02	-110,76	-22,02
<b>bvsr_Pa_A3/6</b>	<b>-255,61</b>	<b>-229,68</b>	<b>-133,14</b>	<b>-136,62</b>	<b>-111,01</b>	<b>-110,81</b>	<b>-22,03</b>
bvss_Pa_A2/7	-255,22	-229,52	-132,94	-136,11	-110,81	-110,60	-22,00
<b>bvss_Pa_A3/6</b>	<b>-255,68</b>	<b>-229,62</b>	<b>-133,04</b>	<b>-136,50</b>	<b>-110,79</b>	<b>-110,71</b>	<b>-22,03</b>

Fortsetzung Tabelle C44

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
bvsr_Pa_A2/7	-11,39	-7,83	-0,01	-3,53
<b>bvsr_Pa_A3/6</b>	<b>-11,76</b>	<b>-7,86</b>	<b>-0,10</b>	<b>-3,78</b>
bvss_Pa_A2/7	-11,81	-8,10	-0,13	-3,51
<b>bvss_Pa_A3/6</b>	<b>-12,16</b>	<b>-8,12</b>	<b>-0,23</b>	<b>-3,77</b>

Fortsetzung Tabelle C44

	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
bvsr_Pa_A2/7	-9,77	-6,27	0,69	-2,56	0,65	0,91	0,06
<b>bvsr_Pa_A3/6</b>	<b>-10,19</b>	<b>-6,34</b>	<b>0,61</b>	<b>-2,87</b>	<b>0,66</b>	<b>0,86</b>	<b>0,05</b>
bvss_Pa_A2/7	-9,80	-6,18	0,81	-2,36	0,86	1,07	0,08
<b>bvss_Pa_A3/6</b>	<b>-10,26</b>	<b>-6,28</b>	<b>0,71</b>	<b>-2,75</b>	<b>0,89</b>	<b>0,96</b>	<b>0,05</b>

Abbildung C45 :

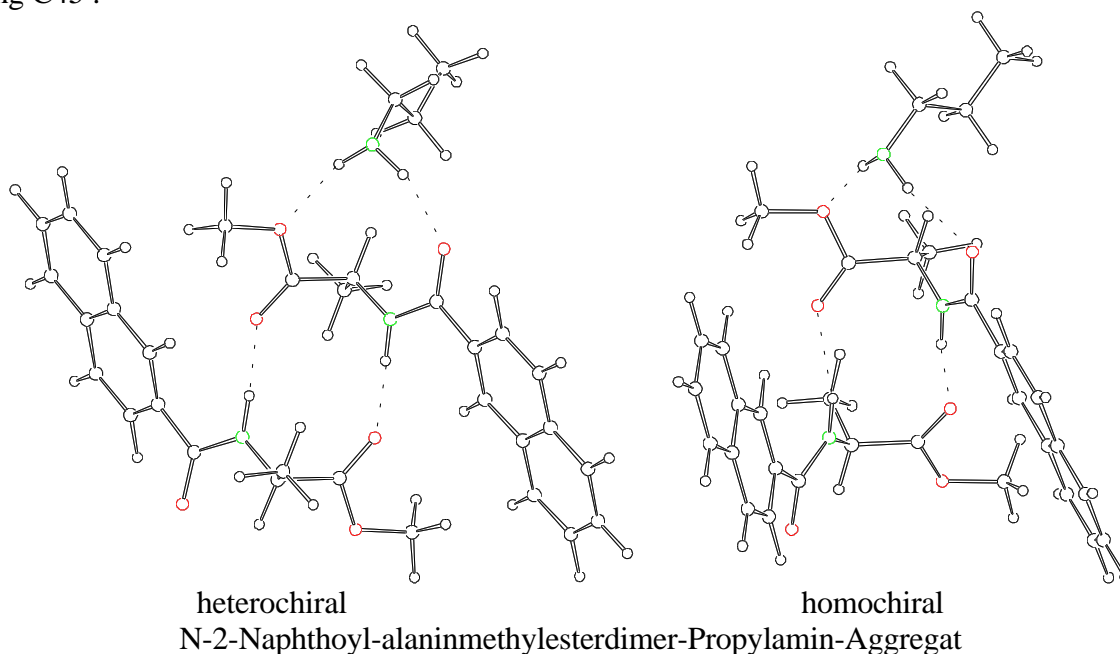


Tabelle C45 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylesterdimer-Propylamin-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
cnsr_Pa_A2/7	-196,69	-170,78	-103,05	-106,55	-81,03	-80,65	-22,01
<b>cnsr_Pa_A3/6</b>	<b>-196,96</b>	<b>-170,78</b>	<b>-103,03</b>	<b>-106,70</b>	<b>-80,93</b>	<b>-80,72</b>	<b>-22,01</b>
cnss_Pa_A2/7	-196,83	-171,22	-103,33	-106,56	-81,34	-80,96	-22,02
<b>cnss_Pa_A3/6</b>	<b>-197,33</b>	<b>-171,46</b>	<b>-103,47</b>	<b>-106,85</b>	<b>-81,29</b>	<b>-81,18</b>	<b>-22,02</b>

Fortsetzung Tabelle C45

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa
cnsr_Pa_A2/7	-12,99	-9,09	0,00	-3,89
<b>cnsr_Pa_A3/6</b>	<b>-13,30</b>	<b>-9,12</b>	<b>-0,09</b>	<b>-3,97</b>
cnss_Pa_A2/7	-12,52	-8,93	0,03	-3,58
<b>cnss_Pa_A3/6</b>	<b>-12,84</b>	<b>-8,99</b>	<b>-0,16</b>	<b>-3,65</b>

Fortsetzung Tabelle C45

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Pa	As2 Pa	As1	As2	Pa
cnsr_Pa_A2/7	-10,01	-6,18	1,33	-2,17	1,27	1,65	0,07
<b>cnsr_Pa_A3/6</b>	<b>-10,28</b>	<b>-6,18</b>	<b>1,35</b>	<b>-2,32</b>	<b>1,37</b>	<b>1,58</b>	<b>0,07</b>
cnss_Pa_A2/7	-10,15	-6,62	1,05	-2,18	0,96	1,34	0,06
<b>cnss_Pa_A3/6</b>	<b>-10,65</b>	<b>-6,86</b>	<b>0,91</b>	<b>-2,47</b>	<b>1,01</b>	<b>1,12</b>	<b>0,06</b>

Abbildung C46 : N-Benzoyl-alaninbenzylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

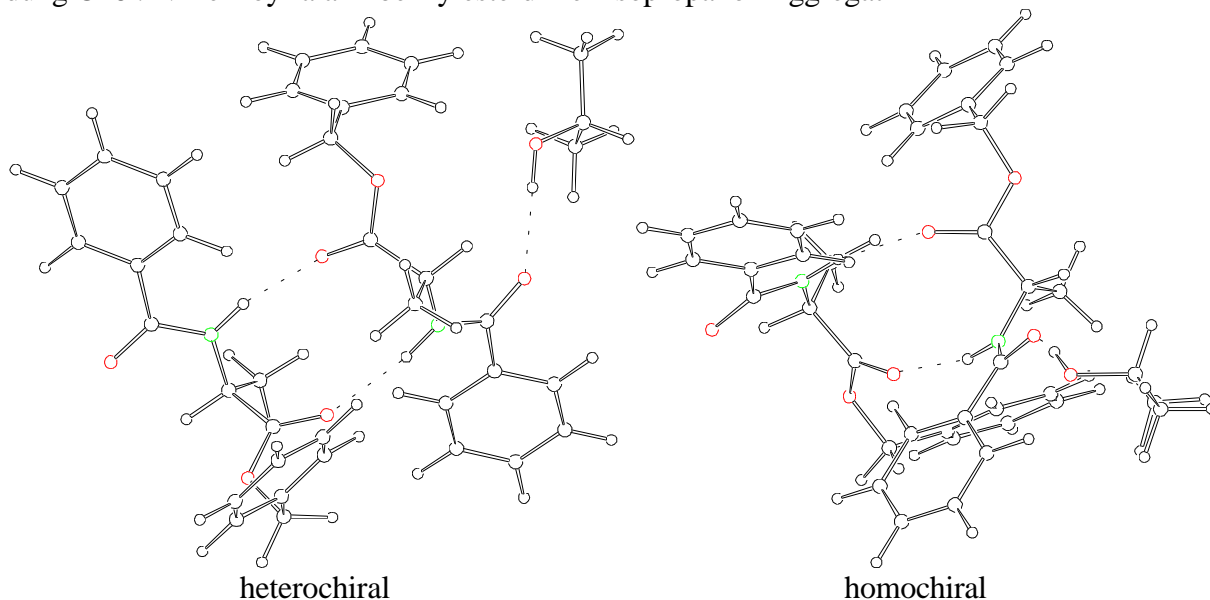


Tabelle C46 : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bbsr_Al_A1	-222,29	-150,23	-143,88	-139,55	-71,61	-71,83	-67,97
<b>bbsr_Al_A2</b>	<b>-222,99</b>	<b>-150,52</b>	<b>-144,19</b>	<b>-139,54</b>	<b>-71,42</b>	<b>-71,99</b>	<b>-67,98</b>
bbsr_Al_A3	-222,11	-150,2	-142,93	-140,08	-71,97	-71,25	-67,96
bbsr_Al_A4	-222,32	-150,25	-143,49	-139,96	-72,01	-71,44	-67,96
bbss_Al_A1	-223,91	-152	-144,16	-140,13	-72,24	-72,19	-67,97
<b>bbss_Al_A2</b>	<b>-224,33</b>	<b>-151,98</b>	<b>-144,48</b>	<b>-140,17</b>	<b>-72,22</b>	<b>-72,2</b>	<b>-67,96</b>
bbss_Al_A3	-223,79	-151,98	-143,78	-140,21	-72,19	-72,16	-67,95
bbss_Al_A4	-223,91	-152	-144,08	-140,18	-72,23	-72,17	-67,97

Fortsetzung Tabelle C46

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
bbsr_Al_A1	-10,88	-6,79	-4,3	0,25
<b>bbsr_Al_A2</b>	<b>-11,6</b>	<b>-7,11</b>	<b>-4,79</b>	<b>0,43</b>
bbsr_Al_A3	-10,93	-6,98	-3	-0,87
bbsr_Al_A4	-10,91	-6,8	-3,52	-0,56
bbss_Al_A1	-11,51	-7,57	-3,95	0,03
<b>bbss_Al_A2</b>	<b>-11,95</b>	<b>-7,56</b>	<b>-4,3</b>	<b>-0,01</b>
bbss_Al_A3	-11,49	-7,63	-3,64	-0,1
bbss_Al_A4	-11,54	-7,6	-3,88	-0,04

Fortsetzung Tabelle C46

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bbsr_Al_A1	-7,19	-4,67	-1,56	2,77	1,17	0,95	1,57
<b>bbsr_Al_A2</b>	<b>-7,89</b>	<b>-4,96</b>	<b>-1,87</b>	<b>2,78</b>	<b>1,36</b>	<b>0,79</b>	<b>1,56</b>
bbsr_Al_A3	-7,01	-4,64	-0,61	2,24	0,81	1,53	1,58
bbsr_Al_A4	-7,22	-4,69	-1,17	2,36	0,77	1,34	1,58
bbss_Al_A1	-8,81	-6,44	-1,84	2,19	0,54	0,59	1,57
<b>bbss_Al_A2</b>	<b>-9,23</b>	<b>-6,42</b>	<b>-2,16</b>	<b>2,15</b>	<b>0,56</b>	<b>0,58</b>	<b>1,58</b>
bbss_Al_A3	-8,69	-6,42	-1,46	2,11	0,59	0,62	1,59
bbss_Al_A4	-8,81	-6,44	-1,76	2,14	0,55	0,61	1,57



Abbildung C47 : N-Benzoyl-alaninethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

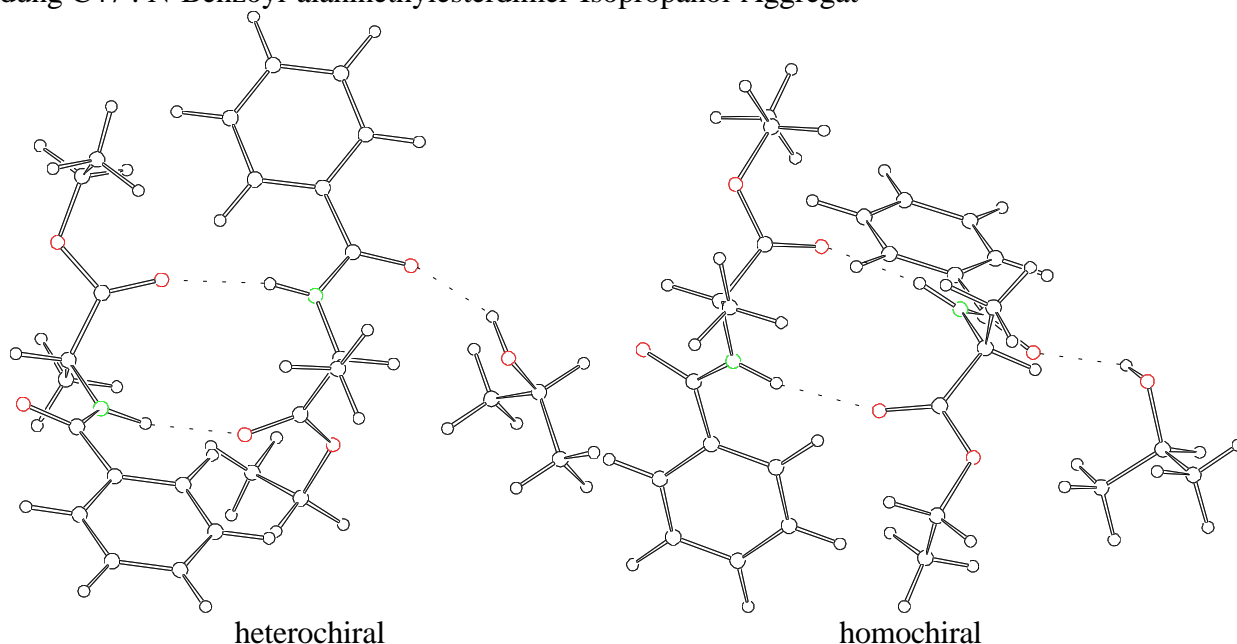


Tabelle C47 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1	Al	As2	Al	Al
besr_Al_A1	-291,74	-219,68	-178,09	-174,03	-105,97	-106,16	-67,97	
besr_Al_A2	-291,41	-219,38	-177,12	-174,24	-106,15	-105,31	-67,95	
<b>besr_Al_A3</b>	<b>-292,06</b>	<b>-219,44</b>	<b>-178,01</b>	<b>-174,28</b>	<b>-106,22</b>	<b>-105,54</b>	<b>-67,99</b>	
besr_Al_A4	-291,49	-219,46	-178,01	-174,36	-106,4	-106	-67,97	
bess_Al_A1	-292,55	-220,58	-178,27	-174,25	-106,33	-106,29	-67,97	
<b>bess_Al_A2</b>	<b>-292,99</b>	<b>-220,55</b>	<b>-178,68</b>	<b>-174,24</b>	<b>-106,32</b>	<b>-106,3</b>	<b>-67,98</b>	
bess_Al_A3	-292,34	-220,56	-177,87	-174,27	-106,28	-106,26	-67,96	
bess_Al_A4	-292,54	-220,58	-178,19	-174,29	-106,32	-106,25	-67,96	

Fortsetzung Tabelle C47

	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
besr_Al_A1	-11,64	-7,55	-4,15	0,1
besr_Al_A2	-12	-7,92	-3,02	-0,98
<b>besr_Al_A3</b>	<b>-12,31</b>	<b>-7,68</b>	<b>-3,8</b>	<b>-0,75</b>
besr_Al_A4	-11,12	-7,06	-3,64	-0,39
bess_Al_A1	-11,96	-7,96	-3,97	0,01
<b>bess_Al_A2</b>	<b>-12,39</b>	<b>-7,93</b>	<b>-4,38</b>	<b>0,04</b>
bess_Al_A3	-11,84	-8,02	-3,63	-0,05
bess_Al_A4	-12,01	-8,01	-3,91	-0,08

Fortsetzung Tabelle C47

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1	Al	As2	Al	Al
besr_Al_A1	-8,38	-5,86	-1,64	2,42	0,94	0,75	1,57	
besr_Al_A2	-8,05	-5,56	-0,67	2,21	0,76	1,6	1,59	
<b>besr_Al_A3</b>	<b>-8,7</b>	<b>-5,62</b>	<b>-1,56</b>	<b>2,17</b>	<b>0,69</b>	<b>1,37</b>	<b>1,55</b>	
besr_Al_A4	-8,13	-5,64	-1,56	2,09	0,51	0,91	1,57	
bess_Al_A1	-9,19	-6,76	-1,82	2,2	0,58	0,62	1,57	
<b>bess_Al_A2</b>	<b>-9,63</b>	<b>-6,73</b>	<b>-2,23</b>	<b>2,21</b>	<b>0,59</b>	<b>0,61</b>	<b>1,56</b>	
bess_Al_A3	-8,98	-6,74	-1,42	2,18	0,63	0,65	1,58	
bess_Al_A4	-9,18	-6,76	-1,74	2,16	0,59	0,66	1,58	

Abbildung C48 : N-Benzoyl-alaninisopropylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

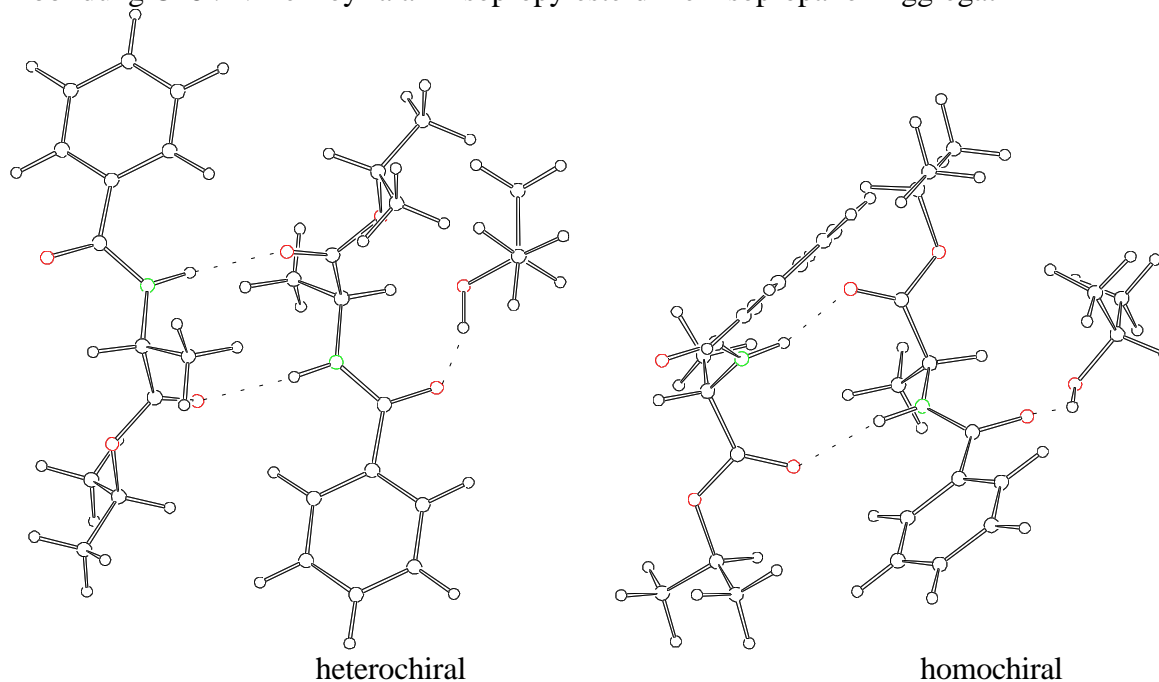


Tabelle C48 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bisr_Al_A1	-300,26	-228,15	-182,07	-178,1	-110,1	-110,01	-67,96
<b>bisr_Al_A2</b>	<b>-300,65</b>	<b>-228,09</b>	<b>-182,33</b>	<b>-177,86</b>	<b>-109,96</b>	<b>-109,81</b>	<b>-67,96</b>
bisr_Al_A3	-299,91	-228,09	-181,47	-177,97	-109,93	-109,83	-67,95
bisr_Al_A4	-300,23	-228,16	-182,04	-178,16	-110,1	-110,08	-67,97
biss_Al_A1	-301	-229	-181,93	-177,94	-110	-109,92	-67,97
<b>biss_Al_A2</b>	<b>-301,51</b>	<b>-228,96</b>	<b>-182,36</b>	<b>-177,88</b>	<b>-109,99</b>	<b>-109,88</b>	<b>-67,95</b>
biss_Al_A3	-300,75	-228,96	-181,51	-178,08	-109,98	-109,98	-67,98
biss_Al_A4	-301,05	-229	-181,92	-178,04	-109,98	-109,98	-67,97

Fortsetzung Tabelle C48

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
bisr_Al_A1	-12,19	-8,04	-4,01	-0,13
<b>bisr_Al_A2</b>	<b>-12,92</b>	<b>-8,32</b>	<b>-4,41</b>	<b>-0,09</b>
bisr_Al_A3	-12,2	-8,33	-3,59	-0,19
bisr_Al_A4	-12,08	-7,98	-3,97	-0,11
biss_Al_A1	-13,11	-9,08	-3,96	-0,05
<b>biss_Al_A2</b>	<b>-13,69</b>	<b>-9,09</b>	<b>-4,42</b>	<b>-0,05</b>
biss_Al_A3	-12,81	-9	-3,55	-0,12
biss_Al_A4	-13,12	-9,04	-3,97	-0,09

Fortsetzung Tabelle C48

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bisr_Al_A1	-8,98	-6,41	-1,66	2,31	0,77	0,86	1,58
<b>bisr_Al_A2</b>	<b>-9,37</b>	<b>-6,35</b>	<b>-1,92</b>	<b>2,55</b>	<b>0,91</b>	<b>1,06</b>	<b>1,58</b>
bisr_Al_A3	-8,63	-6,35	-1,06	2,44	0,94	1,04	1,59
bisr_Al_A4	-8,95	-6,42	-1,63	2,25	0,77	0,79	1,57
biss_Al_A1	-9,72	-7,26	-1,52	2,47	0,87	0,95	1,57
<b>biss_Al_A2</b>	<b>-10,23</b>	<b>-7,22</b>	<b>-1,95</b>	<b>2,53</b>	<b>0,88</b>	<b>0,99</b>	<b>1,59</b>
biss_Al_A3	-9,47	-7,22	-1,1	2,33	0,89	0,89	1,56
biss_Al_A4	-9,77	-7,26	-1,51	2,37	0,89	0,89	1,57

Abbildung C49 : N-Benzoyl-leucinmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

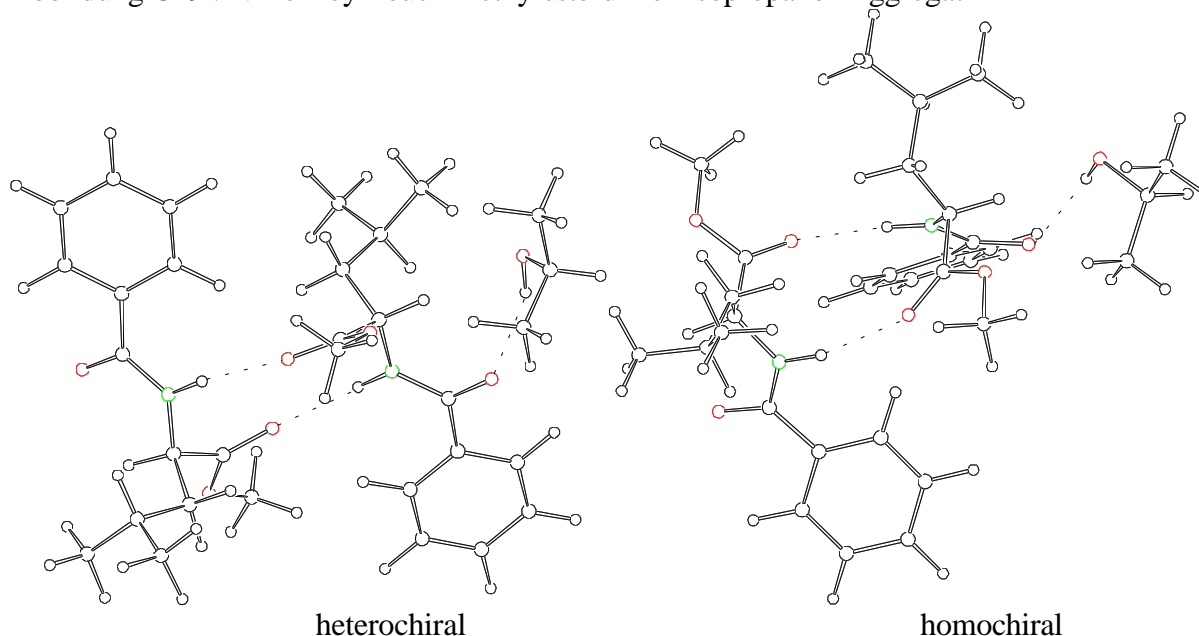


Tabelle C49 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
blsr_Al_A1	-314,49	-242,14	-189,63	-185,67	-117,72	-117,29	-67,97
blsr_Al_A2	-314,9	-242,12	-189,5	-185,76	-117,65	-116,91	-67,98
<b>blsr_Al_A3</b>	<b>-315,14</b>	<b>-242,13</b>	<b>-189,91</b>	<b>-185,74</b>	<b>-117,7</b>	<b>-117</b>	<b>-67,99</b>
blsr_Al_A4	-314,25	-242,22	-189,24	-185,68	-117,74	-117,23	-67,97
blss_Al_A1	-314,9	-242,82	-189,9	-185,75	-117,81	-117,84	-67,95
<b>blss_Al_A2</b>	<b>-315,92</b>	<b>-242,96</b>	<b>-190,15</b>	<b>-185,39</b>	<b>-117,44</b>	<b>-117,24</b>	<b>-67,99</b>
blss_Al_A3	-315,64	-242,99	-189,98	-185,58	-117,52	-117,52	-67,98
blss_Al_A4	-314,96	-242,85	-189,81	-185,77	-117,79	-117,73	-67,98

Fortsetzung Tabelle C49

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
blsr_Al_A1	-11,51	-7,13	-3,94	-0,41
blsr_Al_A2	-12,36	-7,56	-3,87	-0,87
<b>blsr_Al_A3</b>	<b>-12,45</b>	<b>-7,43</b>	<b>-4,22</b>	<b>-0,75</b>
blsr_Al_A4	-11,31	-7,25	-3,53	-0,48
blss_Al_A1	-11,3	-7,17	-4,14	0,04
<b>blss_Al_A2</b>	<b>-13,25</b>	<b>-8,28</b>	<b>-4,72</b>	<b>-0,16</b>
blss_Al_A3	-12,62	-7,95	-4,48	-0,08
blss_Al_A4	-11,46	-7,33	-4,04	-0,06

Fortsetzung Tabelle C49

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
blsr_Al_A1	-8,19	-5,38	-1,71	2,25	0,66	1,09	1,57
blsr_Al_A2	-8,6	-5,36	-1,58	2,16	0,73	1,47	1,56
<b>blsr_Al_A3</b>	<b>-8,84</b>	<b>-5,37</b>	<b>-1,99</b>	<b>2,18</b>	<b>0,68</b>	<b>1,38</b>	<b>1,55</b>
blsr_Al_A4	-7,95	-5,46	-1,32	2,24	0,64	1,15	1,57
blss_Al_A1	-8,6	-6,06	-1,98	2,17	0,57	0,54	1,59
<b>blss_Al_A2</b>	<b>-9,62</b>	<b>-6,2</b>	<b>-2,23</b>	<b>2,53</b>	<b>0,94</b>	<b>1,14</b>	<b>1,55</b>
blss_Al_A3	-9,34	-6,23	-2,06	2,34	0,86	0,86	1,56
blss_Al_A4	-8,66	-6,09	-1,89	2,15	0,59	0,65	1,56

Abbildung C50 : N-Benzoyl-alaninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

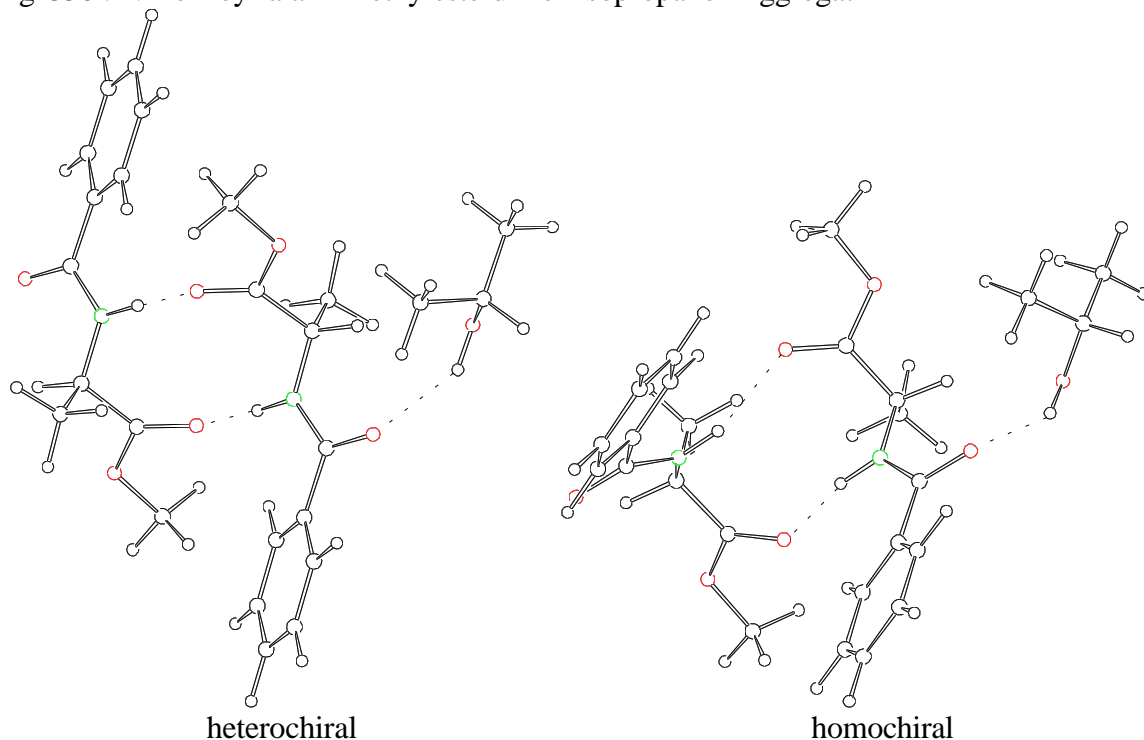


Tabelle C50 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bmsr_Al_A1	-280.40	-208.39	-172.14	-168.23	-100.26	-100.15	-67.97
<b>bmsr_Al_A2</b>	<b>-280.82</b>	<b>-208.36</b>	<b>-172.57</b>	<b>-168.11</b>	<b>-100.24</b>	<b>-100.11</b>	<b>-67.96</b>
bmsr_Al_A3	-280.10	-208.35	-171.73	-168.31	-100.23	-100.16	-67.97
bmsr_Al_A4	-280.42	-208.39	-172.13	-168.30	-100.24	-100.21	-67.97
bmss_Al_A1	-280.73	-208.77	-172.01	-168.02	-100.09	-100.02	-67.97
<b>bmss_Al_A2</b>	<b>-281.26</b>	<b>-208.73</b>	<b>-172.47</b>	<b>-168.00</b>	<b>-100.09</b>	<b>-100.01</b>	<b>-67.95</b>
bmss_Al_A3	-280.51	-208.57	-171.56	-168.18	-99.99	-99.96	-67.97
bmss_Al_A4	-280.78	-208.76	-171.95	-168.14	-100.05	-100.06	-67.97

Fortsetzung Tabelle C50

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
bmsr_Al_A1	-12,02	-7,98	-3,91	-0,11
<b>bmsr_Al_A2</b>	<b>-12,51</b>	<b>-8,01</b>	<b>-4,37</b>	<b>-0,04</b>
bmsr_Al_A3	-11,74	-7,96	-3,53	-0,18
bmsr_Al_A4	-12,00	-7,94	-3,92	-0,12
bmss_Al_A1	-12,65	-8,66	-3,95	-0,03
<b>bmss_Al_A2</b>	<b>-13,21</b>	<b>-8,63</b>	<b>-4,43</b>	<b>-0,04</b>
bmss_Al_A3	-12,59	-8,62	-3,6	-0,25
bmss_Al_A4	-12,7	-8,65	-3,93	-0,11

Fortsetzung Tabelle C50

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bmsr_Al_A1	-8,92	-6,45	-1,63	2,28	0,71	0,82	1,57
<b>bmsr_Al_A2</b>	<b>-9,34</b>	<b>-6,42</b>	<b>-2,06</b>	<b>2,4</b>	<b>0,73</b>	<b>0,86</b>	<b>1,58</b>
bmsr_Al_A3	-8,62	-6,41	-1,22	2,2	0,74	0,81	1,57
bmsr_Al_A4	-8,94	-6,45	-1,62	2,21	0,73	0,76	1,57
bmss_Al_A1	-9,25	-6,83	-1,5	2,49	0,88	0,95	1,57
<b>bmss_Al_A2</b>	<b>-9,78</b>	<b>-6,79</b>	<b>-1,96</b>	<b>2,51</b>	<b>0,88</b>	<b>0,96</b>	<b>1,59</b>
bmss_Al_A3	-9,03	-6,63	-1,05	2,33	0,98	1,01	1,57
bmss_Al_A4	-9,3	-6,82	-1,44	2,37	0,92	0,91	1,57

Abbildung C51 : N-Benzoyl-phenylalaninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

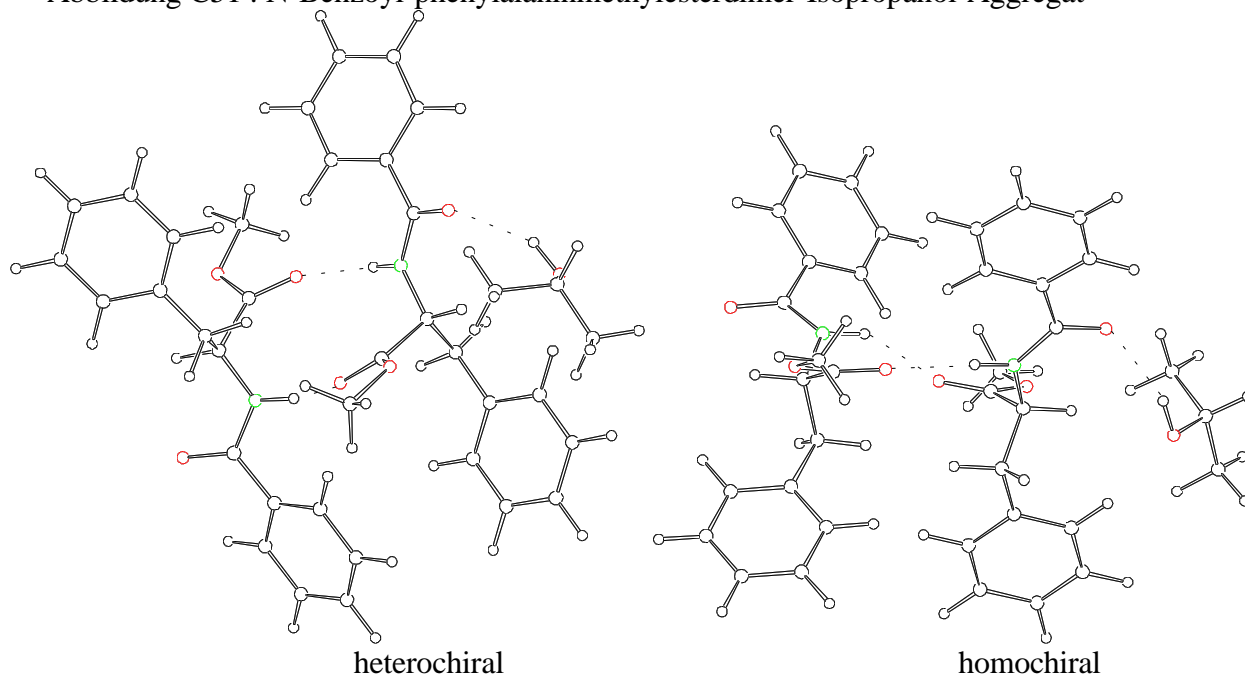


Tabelle C51 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bpsr_Al_A1	-224,85	-152,84	-144,19	-140,31	-72,32	-72,21	-67,97
<b>bpsr_Al_A2</b>	<b>-226,19</b>	<b>-152,6</b>	<b>-145,36</b>	<b>-140,22</b>	<b>-72,28</b>	<b>-71,86</b>	<b>-67,96</b>
bpsr_Al_A3	-225,57	-152,71	-144,64	-140,32	-72,22	-72,01	-67,97
bpsr_Al_A4	-225,13	-153,15	-144,23	-140,25	-72,23	-72,32	-67,96
bpss_Al_A1	-224,96	-152,97	-144,18	-140,19	-72,21	-72,19	-67,97
<b>bpss_Al_A2</b>	<b>-226,52</b>	<b>-152,84</b>	<b>-145,27</b>	<b>-140,11</b>	<b>-72,13</b>	<b>-71,71</b>	<b>-67,98</b>
bpss_Al_A3	-226,33	-153,46	-144,64	-140,2	-72,16	-71,98	-67,96
bpss_Al_A4	-225,52	-153,56	-144,05	-140,2	-72,16	-72,16	-67,97

Fortsetzung Tabelle C51

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
bpsr_Al_A1	-12,35	-8,31	-3,9	-0,13
<b>bpsr_Al_A2</b>	<b>-14,09</b>	<b>-8,46</b>	<b>-5,12</b>	<b>-0,4</b>
bpsr_Al_A3	-13,37	-8,48	-4,45	-0,34
bpsr_Al_A4	-12,62	-8,6	-4,04	0,03
bpss_Al_A1	-12,59	-8,57	-4	-0,03
<b>bpss_Al_A2</b>	<b>-14,7</b>	<b>-9</b>	<b>-5,16</b>	<b>-0,42</b>
bpss_Al_A3	-14,23	-9,32	-4,52	-0,26
bpss_Al_A4	-13,23	-9,24	-3,92	-0,07

Fortsetzung Tabelle C51

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
bpsr_Al_A1	-8,23	-5,76	-1,11	2,77	1,22	1,33	1,57
<b>bpsr_Al_A2</b>	<b>-9,57</b>	<b>-5,52</b>	<b>-2,28</b>	<b>2,86</b>	<b>1,26</b>	<b>1,68</b>	<b>1,58</b>
bpsr_Al_A3	-8,95	-5,63	-1,56	2,76	1,32	1,53	1,57
bpsr_Al_A4	-8,51	-6,07	-1,15	2,83	1,31	1,22	1,58
bpss_Al_A1	-8,34	-5,89	-1,1	2,89	1,33	1,35	1,57
<b>bpss_Al_A2</b>	<b>-9,9</b>	<b>-5,76</b>	<b>-2,19</b>	<b>2,97</b>	<b>1,41</b>	<b>1,83</b>	<b>1,56</b>
bpss_Al_A3	-9,71	-6,38	-1,56	2,88	1,38	1,56	1,58
bpss_Al_A4	-8,9	-6,48	-0,97	2,88	1,38	1,38	1,57

Abbildung C52 : N-Benzoyl-threoninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

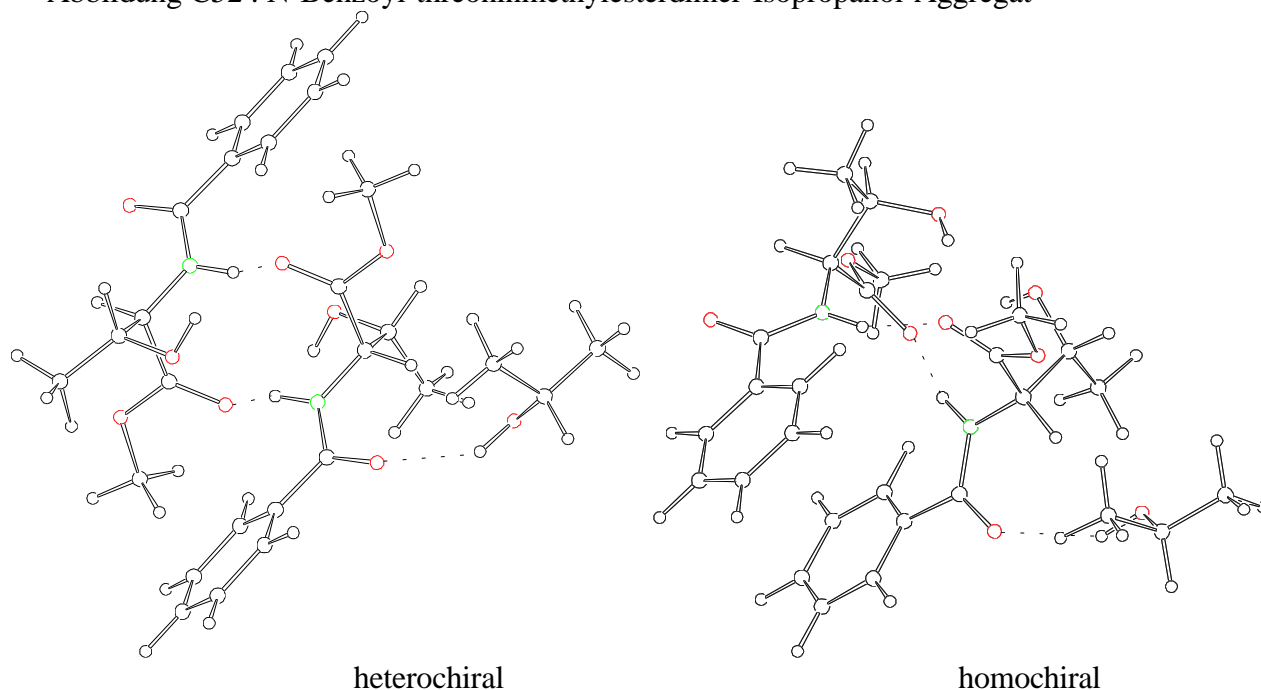


Tabelle C52 : Energien des N-Benzoyl-threoninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
btsr_Al_A1	-386,58	-314,67	-221,79	-217,96	-150	-149,88	-67,97
<b>btsr_Al_A2</b>	<b>-388,05</b>	<b>-314,63</b>	<b>-223,26</b>	<b>-217,89</b>	<b>-150,01</b>	<b>-149,85</b>	<b>-67,95</b>
btsr_Al_A3	-387,4	-314,63	-222,55	-218,1	-150,01	-149,96	-67,98
btsr_Al_A4	-386,57	-314,68	-221,76	-218,01	-149,98	-149,95	-67,98
btss_Al_A1	-385,29	-313,41	-220,97	-217,14	-149,25	-149,03	-67,97
<b>btss_Al_A2</b>	<b>-386,54</b>	<b>-313,34</b>	<b>-222,61</b>	<b>-216,75</b>	<b>-149</b>	<b>-149,28</b>	<b>-67,94</b>
btss_Al_A3	-385,88	-313,33	-221,92	-216,92	-148,95	-149,43	-67,96
btss_Al_A4	-385,41	-313,42	-220,89	-217,4	-149,23	-149,08	-67,97

Fortsetzung Tabelle C52

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
btsr_Al_A1	-18,73	-14,79	-3,82	-0,11
<b>btsr_Al_A2</b>	<b>-20,24</b>	<b>-14,77</b>	<b>-5,3</b>	<b>-0,09</b>
btsr_Al_A3	-19,45	-14,66	-4,56	-0,16
btsr_Al_A4	-18,66	-14,75	-3,8	-0,08
btss_Al_A1	-19,04	-15,13	-3,75	-0,14
<b>btss_Al_A2</b>	<b>-20,32</b>	<b>-15,06</b>	<b>-5,67</b>	<b>0,47</b>
btss_Al_A3	-19,54	-14,95	-5,01	0,47
btss_Al_A4	-19,13	-15,11	-3,69	-0,35

Fortsetzung Tabelle C52

	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
Substruktur	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
btsr_Al_A1	-11,66	-9,29	0,44	4,27	2,69	2,81	1,57
<b>btsr_Al_A2</b>	<b>-13,13</b>	<b>-9,25</b>	<b>-1,03</b>	<b>4,34</b>	<b>2,68</b>	<b>2,84</b>	<b>1,59</b>
btsr_Al_A3	-12,48	-9,25	-0,32	4,13	2,68	2,73	1,56
btsr_Al_A4	-11,65	-9,3	0,47	4,22	2,71	2,74	1,56
btss_Al_A1	-10,37	-8,03	1,26	5,09	3,44	3,66	1,57
<b>btss_Al_A2</b>	<b>-11,62</b>	<b>-7,96</b>	<b>-0,38</b>	<b>5,48</b>	<b>3,69</b>	<b>3,41</b>	<b>1,6</b>
btss_Al_A3	-10,96	-7,95	0,31	5,31	3,74	3,26	1,58
btss Al A4	-10,49	-8,04	1,34	4,83	3,46	3,61	1,57

Abbildung C53 : N-Benzoyl-valinmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

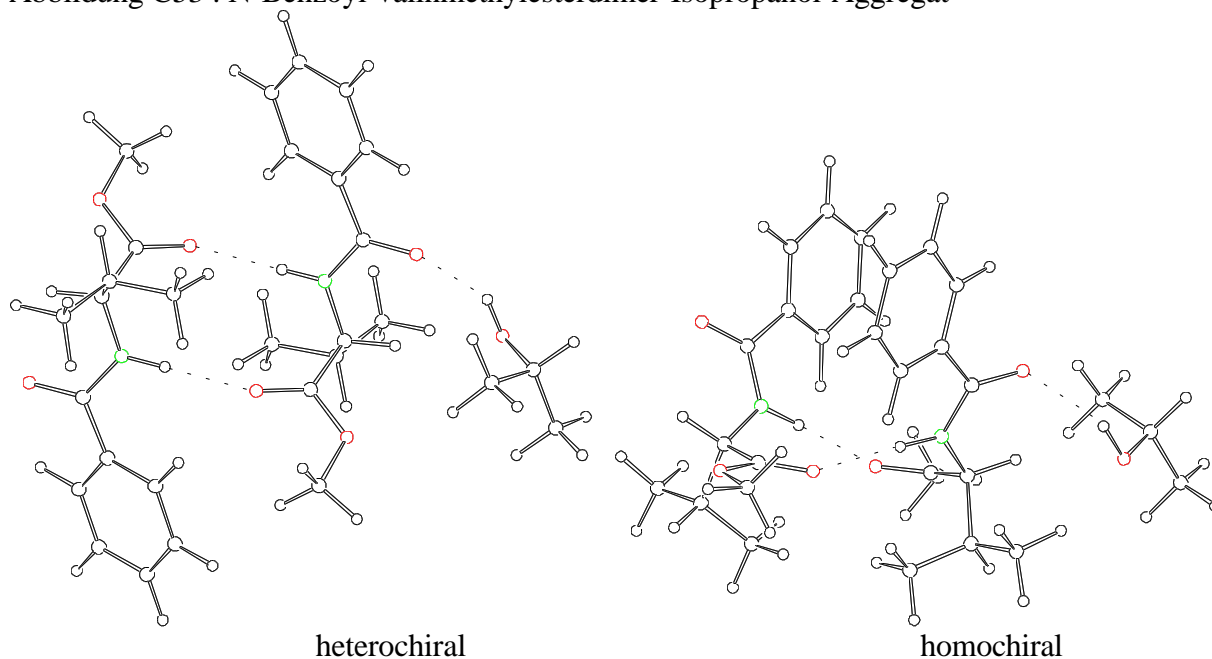


Tabelle C53 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1	Al	As2	Al	
bvsr_Al_A1	-301,84	-229,81	-182,92	-179,06	-111,01	-111	-67,96	
bvsr_Al_A2	-302,42	-229,76	-183,56	-178,82	-111,02	-110,89	-67,86	
<b>bvsr_Al_A3</b>	<b>-304,08</b>	<b>-229,63</b>	<b>-180,22</b>	<b>-185,42</b>	<b>-110,83</b>	<b>-110,95</b>	<b>-69,47</b>	
bvsr_Al_A4	-301,86	-229,8	-183,03	-179	-111,01	-111,02	-67,96	
bvss_Al_A1	-301,77	-229,8	-182,8	-178,82	-110,88	-110,82	-67,97	
<b>bvss_Al_A2</b>	<b>-302,87</b>	<b>-229,77</b>	<b>-183,92</b>	<b>-178,78</b>	<b>-110,86</b>	<b>-110,87</b>	<b>-67,97</b>	
bvss_Al_A3	-302,27	-229,76	-183,29	-178,91	-110,85	-110,94	-67,98	
bvss_Al_A4	-301,82	-229,8	-182,76	-179	-110,91	-110,87	-67,97	

Fortsetzung Tabelle C53

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1	As2	Al
bvsr_Al_A1	-11,87	-7,8	-3,95	-0,1
bvsr_Al_A2	-12,65	-7,85	-4,68	-0,07
<b>bvsr_Al_A3</b>	<b>-12,83</b>	<b>-7,85</b>	<b>0,08</b>	<b>-4,99</b>
bvsr_Al_A4	-11,87	-7,77	-4,06	-0,02
bvss_Al_A1	-12,1	-8,1	-3,95	-0,03
<b>bvss_Al_A2</b>	<b>-13,17</b>	<b>-8,04</b>	<b>-5,09</b>	<b>0,06</b>
bvss_Al_A3	-12,5	-7,97	-4,46	0,01
bvss_Al_A4	-12,07	-8,02	-3,88	-0,16

Fortsetzung Tabelle C53

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)							
	Gesamt	As1	As2	As1	Al	As2	Al	
bvsr_Al_A1	-8,96	-6,47	-1,71	2,15	0,66	0,67	1,58	
bvsr_Al_A2	-9,54	-6,42	-2,35	2,39	0,65	0,78	1,68	
<b>bvsr_Al_A3</b>	<b>-11,20</b>	<b>-6,29</b>	<b>0,99</b>	<b>-4,21</b>	<b>0,84</b>	<b>0,72</b>	<b>0,07</b>	
bvsr_Al_A4	-8,98	-6,46	-1,82	2,21	0,66	0,65	1,58	
bvss_Al_A1	-8,89	-6,46	-1,59	2,39	0,79	0,85	1,57	
<b>bvss_Al_A2</b>	<b>-9,99</b>	<b>-6,43</b>	<b>-2,71</b>	<b>2,43</b>	<b>0,81</b>	<b>0,8</b>	<b>1,57</b>	
bvss_Al_A3	-9,39	-6,42	-2,08	2,3	0,82	0,73	1,56	
bvss_Al_A4	-8,94	-6,46	-1,55	2,21	0,76	0,8	1,57	

Abbildung C54 : N-2-Naphthoyl-alaninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregat

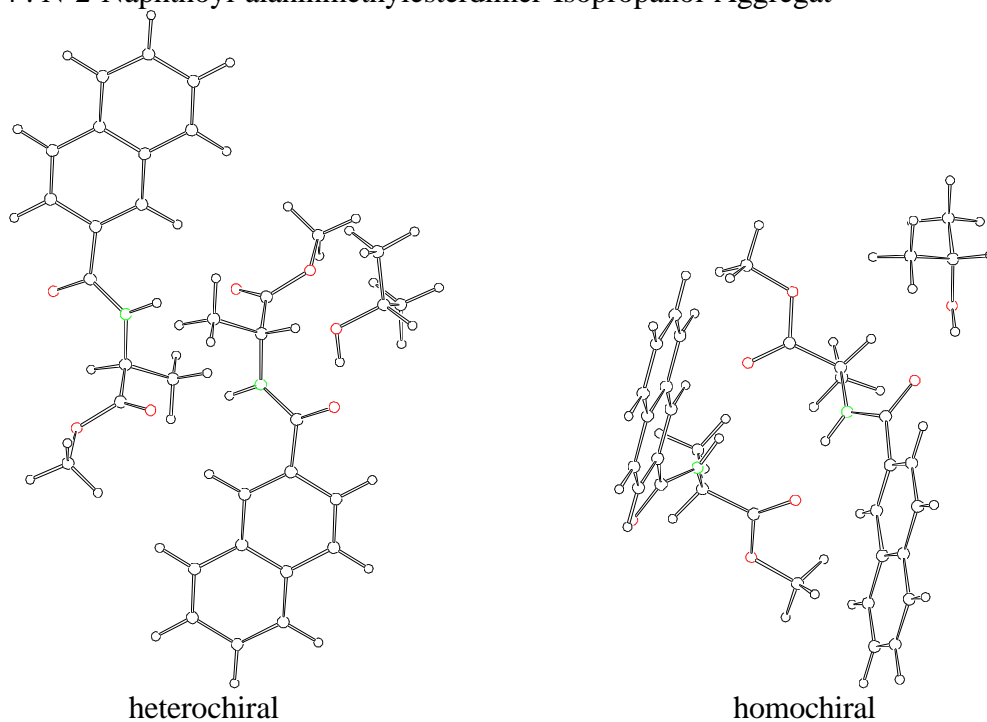


Tabelle C54 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylesterdimer-Isopropanol-Aggregates

Substruktur	H / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
cnsr_Al_A1	-242,98	-170,98	-152,85	-149,03	-80,98	-80,96	-67,97
cnsr_Al_A2	-242,83	-170,95	-152,59	-148,98	-80,95	-80,89	-67,95
<b>cnsr_Al_A3</b>	<b>-243,48</b>	<b>-170,96</b>	<b>-153,43</b>	<b>-148,84</b>	<b>-80,94</b>	<b>-80,92</b>	<b>-67,98</b>
cnsr_Al_A4	-242,89	-170,98	-152,84	-148,97	-80,99	-80,95	-67,97
cnss_Al_A1	-243,54	-171,63	-153,24	-149,36	-81,42	-81,32	-67,97
<b>cnss_Al_A2</b>	<b>-244,15</b>	<b>-171,6</b>	<b>-153,76</b>	<b>-149,33</b>	<b>-81,4</b>	<b>-81,31</b>	<b>-67,95</b>
cnss_Al_A3	-243,42	-171,6	-152,93	-149,51	-81,38	-81,39	-67,97
cnss_Al_A4	-243,52	-171,63	-153,23	-149,4	-81,4	-81,39	-67,97

Fortsetzung Tabelle C54

Substruktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)			
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al
cnsr_Al_A1	-13,07	-9,04	-3,9	-0,1
cnsr_Al_A2	-13,04	-9,11	-3,69	-0,14
<b>cnsr_Al_A3</b>	<b>-13,64</b>	<b>-9,1</b>	<b>-4,51</b>	<b>0,06</b>
cnsr_Al_A4	-12,98	-9,04	-3,88	-0,05
cnss_Al_A1	-12,83	-8,89	-3,85	-0,07
<b>cnss_Al_A2</b>	<b>-13,49</b>	<b>-8,89</b>	<b>-4,41</b>	<b>-0,07</b>
cnss_Al_A3	-12,68	-8,83	-3,58	-0,15
cnss_Al_A4	-12,76	-8,84	-3,86	-0,04

Fortsetzung Tabelle C54

Substruktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)						
	Gesamt	As1 As2	As1 Al	As2 Al	As1	As2	Al
cnsr_Al_A1	-8,84	-6,38	-1,01	2,81	1,32	1,34	1,57
cnsr_Al_A2	-8,69	-6,35	-0,75	2,86	1,35	1,41	1,59
<b>cnsr_Al_A3</b>	<b>-9,34</b>	<b>-6,36</b>	<b>-1,59</b>	<b>3</b>	<b>1,36</b>	<b>1,38</b>	<b>1,56</b>
cnsr_Al_A4	-8,75	-6,38	-1	2,87	1,31	1,35	1,57
cnss_Al_A1	-9,4	-7,03	-1,4	2,48	0,88	0,98	1,57
<b>cnss_Al_A2</b>	<b>-10,01</b>	<b>-7</b>	<b>-1,92</b>	<b>2,51</b>	<b>0,9</b>	<b>0,99</b>	<b>1,59</b>
cnss_Al_A3	-9,28	-7	-1,09	2,33	0,92	0,91	1,57
cnss_Al_A4	-9,38	-7,03	-1,39	2,44	0,9	0,91	1,57



Abbildung C55 :

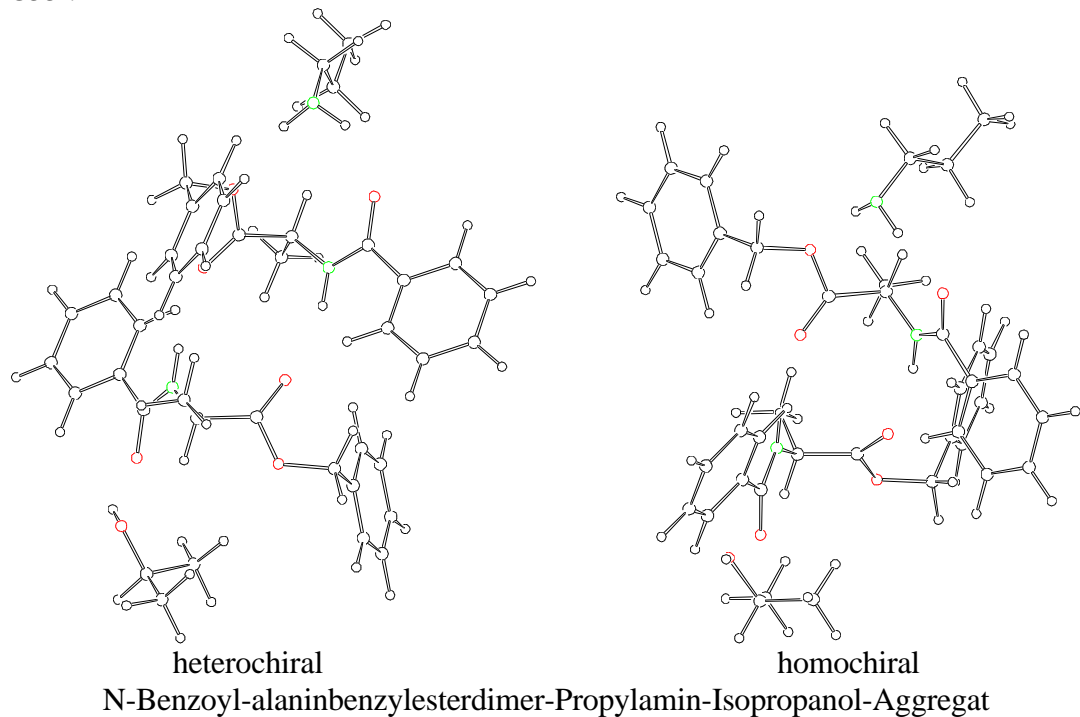


Tabelle C55 : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

	H / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
bbsr_e_1	-248,44	-176,42	-222,05	-165,07	-165,97	-150,02	-97,14	-138,79	-93,93	-143,82	-90,02	-70,85	-71,78	-67,97	-22,05
bbsr_e_2	-248,85	-176,36	-222,44	-165,15	-166,39	-149,97	-97,15	-138,85	-93,99	-144,22	-90,03	-70,87	-71,83	-67,97	-22,05
bbsr_e_3	-248,23	-176,39	-221,80	-165,19	-165,61	-149,98	-97,13	-138,87	-93,94	-143,44	-90,02	-70,84	-71,78	-67,95	-22,05
bbsr_e_4	-248,45	-176,41	-222,07	-165,07	-166,01	-150,01	-97,15	-138,80	-93,97	-143,88	-90,00	-70,86	-71,82	-67,96	-22,05
bbsr_z_1	-248,70	-176,67	-222,09	-165,37	-165,85	-150,05	-97,45	-138,87	-93,82	-143,83	-89,94	-70,93	-71,78	-67,97	-21,98
<b>bbsr_z_2</b>	<b>-249,08</b>	<b>-176,61</b>	<b>-222,48</b>	<b>-165,43</b>	<b>-166,25</b>	<b>-150,00</b>	<b>-97,46</b>	<b>-138,93</b>	<b>-93,88</b>	<b>-144,23</b>	<b>-89,93</b>	<b>-70,95</b>	<b>-71,83</b>	<b>-67,97</b>	<b>-21,98</b>
bbsr_z_3	-248,46	-176,64	-221,83	-165,47	-165,47	-150,01	-97,44	-138,94	-93,82	-143,44	-89,93	-70,91	-71,78	-67,95	-21,98
bbsr_z_4	-248,72	-176,66	-222,11	-165,39	-165,92	-150,03	-97,45	-138,88	-93,86	-143,88	-89,94	-70,94	-71,82	-67,96	-21,98
bbss_e_1	-249,39	-177,49	-223,59	-165,16	-166,28	-151,67	-97,31	-139,75	-94,30	-143,96	-89,99	-71,88	-71,97	-67,97	-22,02
bbss_e_2	-249,79	-177,46	-224,01	-165,14	-166,61	-151,66	-97,27	-139,75	-94,32	-144,29	-89,98	-71,87	-71,98	-67,96	-22,02
bbss_e_3	-249,22	-177,34	-223,41	-165,39	-165,92	-151,52	-97,27	-139,98	-94,34	-143,58	-89,97	-71,86	-71,99	-67,96	-22,02
bbss_e_4	-249,45	-177,49	-223,63	-165,21	-166,34	-151,66	-97,32	-139,79	-94,33	-144,01	-89,99	-71,90	-71,99	-67,97	-22,02
bbss_z_1	-249,58	-177,69	-223,62	-165,62	-166,05	-151,70	-97,77	-139,85	-94,08	-143,93	-89,94	-71,98	-71,94	-67,97	-22,00
<b>bbss_z_2</b>	<b>-250,07</b>	<b>-177,68</b>	<b>-223,94</b>	<b>-165,69</b>	<b>-166,45</b>	<b>-151,55</b>	<b>-97,76</b>	<b>-139,70</b>	<b>-94,14</b>	<b>-144,38</b>	<b>-89,95</b>	<b>-71,76</b>	<b>-72,07</b>	<b>-67,96</b>	<b>-21,98</b>
bbss_z_3	-249,40	-177,53	-223,45	-165,86	-165,73	-151,61	-97,73	-140,12	-94,13	-143,55	-89,98	-72,02	-71,98	-67,96	-22,00
bbss_z_4	-249,63	-177,68	-223,67	-165,66	-166,10	-151,69	-97,78	-139,89	-94,11	-143,99	-89,94	-71,98	-71,97	-67,97	-22,00

Fortsetzung Tabelle C55

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
bbsr_e_1	-15,78	-11,73	-11,45	-4,19	-4,17	-7,38	-4,24	0,04	-0,10	-4,07	0,01	-8,41	-7,47	-4,05	-4,33
bbsr_e_2	-16,14	-11,61	-11,78	-4,26	-4,55	-7,26	-4,23	-0,01	-0,11	-4,42	-0,02	-8,86	-7,48	-4,53	-4,36
bbsr_e_3	-15,60	-11,71	-11,23	-4,34	-3,82	-7,36	-4,24	-0,08	-0,10	-3,70	-0,02	-8,22	-7,66	-3,89	-4,37
bbsr_e_4	-15,75	-11,68	-11,43	-4,20	-4,18	-7,33	-4,24	0,02	-0,10	-4,10	0,02	-8,44	-7,42	-4,08	-4,33
bbsr_z_1	-16,03	-11,98	-11,41	-4,49	-4,13	-7,33	-4,54	0,03	-0,06	-4,08	0,01	-8,72	-7,42	-4,06	-4,63
bbsr_z_2	-16,35	-11,85	-11,73	-4,53	-4,47	-7,21	-4,53	-0,01	-0,06	-4,43	0,01	-9,15	-7,39	-4,50	-4,62
<b>bbsr_z_3</b>	<b>-15,83</b>	<b>-11,97</b>	<b>-11,18</b>	<b>-4,62</b>	<b>-3,76</b>	<b>-7,31</b>	<b>-4,55</b>	<b>-0,08</b>	<b>-0,06</b>	<b>-3,71</b>	<b>0,00</b>	<b>-8,53</b>	<b>-7,58</b>	<b>-3,87</b>	<b>-4,65</b>
bbsr_z_4	-16,02	-11,93	-11,39	-4,51	-4,16	-7,28	-4,54	0,02	-0,06	-4,10	0,00	-8,75	-7,38	-4,10	-4,64
bbss_e_1	-15,55	-11,62	-11,77	-3,29	-4,32	-7,82	-3,40	0,10	-0,31	-4,02	0,00	-7,73	-8,13	-3,93	-3,78
bbss_e_2	-15,96	-11,59	-12,20	-3,29	-4,65	-7,81	-3,38	0,07	-0,31	-4,35	0,01	-8,15	-8,23	-4,37	-3,76
bbss_e_3	-15,40	-11,47	-11,60	-3,55	-3,96	-7,67	-3,38	-0,16	-0,33	-3,63	0,00	-7,73	-8,38	-3,93	-3,80
bbss_e_4	-15,57	-11,58	-11,77	-3,33	-4,36	-7,77	-3,40	0,07	-0,31	-4,05	0,00	-7,80	-8,11	-3,99	-3,79
bbss_z_1	-15,70	-11,77	-11,74	-3,68	-4,14	-7,78	-3,80	0,09	-0,14	-4,02	0,02	-7,94	-7,88	-3,93	-3,96
<b>bbss_z_2</b>	<b>-16,30</b>	<b>-11,87</b>	<b>-12,15</b>	<b>-3,99</b>	<b>-4,44</b>	<b>-7,73</b>	<b>-4,01</b>	<b>0,03</b>	<b>-0,09</b>	<b>-4,35</b>	<b>0,00</b>	<b>-8,57</b>	<b>-7,94</b>	<b>-4,43</b>	<b>-4,15</b>
bbss_z_3	-15,44	-11,53	-11,49	-3,89	-3,78	-7,61	-3,71	-0,15	-0,15	-3,61	-0,02	-7,81	-8,12	-3,91	-3,95
bbss_z_4	-15,71	-11,73	-11,74	-3,71	-4,17	-7,73	-3,80	0,06	-0,14	-4,05	0,02	-8,00	-7,86	-3,98	-3,97

Fortsetzung Tabelle C55

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
bbsr_e_1	-11,26	-8,78	-6,95	-0,67	-1,57	-4,46	-2,28	3,53	0,93	-1,50	1,60	1,93	1,00	0,03	1,57
bbsr_e_2	-11,67	-8,72	-7,34	-0,75	-1,99	-4,41	-2,29	3,47	0,87	-1,90	1,59	1,91	0,95	0,03	1,57
bbsr_e_3	-11,05	-8,75	-6,70	-0,79	-1,21	-4,42	-2,27	3,45	0,92	-1,12	1,60	1,94	1,00	0,03	1,59
bbsr_e_4	-11,27	-8,77	-6,97	-0,67	-1,61	-4,45	-2,29	3,52	0,89	-1,56	1,62	1,92	0,96	0,03	1,58
bbsr_z_1	-11,52	-9,03	-6,99	-0,97	-1,45	-4,49	-2,59	3,45	1,04	-1,51	1,68	1,85	1,00	0,10	1,57
<b>bbsr_z_2</b>	<b>-11,90</b>	<b>-8,97</b>	<b>-7,38</b>	<b>-1,03</b>	<b>-1,85</b>	<b>-4,44</b>	<b>-2,60</b>	<b>3,39</b>	<b>0,98</b>	<b>-1,91</b>	<b>1,69</b>	<b>1,83</b>	<b>0,95</b>	<b>0,10</b>	<b>1,57</b>
bbsr_z_3	-11,28	-9,00	-6,73	-1,07	-1,07	-4,45	-2,58	3,38	1,04	-1,12	1,69	1,87	1,00	0,10	1,59
bbsr_z_4	-11,54	-9,02	-7,01	-0,99	-1,52	-4,47	-2,59	3,44	1,00	-1,56	1,68	1,84	0,96	0,10	1,58
bbss_e_1	-12,21	-9,85	-8,49	-0,76	-1,88	-6,11	-2,45	2,57	0,56	-1,64	1,63	0,90	0,81	0,06	1,57
bbss_e_2	-12,61	-9,82	-8,91	-0,74	-2,21	-6,10	-2,41	2,57	0,54	-1,97	1,64	0,91	0,80	0,06	1,58
bbss_e_3	-12,04	-9,70	-8,31	-0,99	-1,52	-5,96	-2,41	2,34	0,52	-1,26	1,65	0,92	0,79	0,06	1,58
bbss_e_4	-12,27	-9,85	-8,53	-0,81	-1,94	-6,10	-2,46	2,53	0,53	-1,69	1,63	0,88	0,79	0,06	1,57
bbss_z_1	-12,40	-10,05	-8,52	-1,22	-1,65	-6,14	-2,91	2,47	0,78	-1,61	1,68	0,80	0,84	0,08	1,57
<b>bbss_z_2</b>	<b>-12,89</b>	<b>-10,04</b>	<b>-8,84</b>	<b>-1,29</b>	<b>-2,05</b>	<b>-5,99</b>	<b>-2,90</b>	<b>2,62</b>	<b>0,72</b>	<b>-2,06</b>	<b>1,67</b>	<b>1,02</b>	<b>0,71</b>	<b>0,10</b>	<b>1,58</b>
bbss_z_3	-12,22	-9,89	-8,35	-1,46	-1,33	-6,05	-2,87	2,20	0,73	-1,23	1,64	0,76	0,80	0,08	1,58
bbss_z_4	-12,45	-10,04	-8,57	-1,26	-1,70	-6,13	-2,92	2,43	0,75	-1,67	1,68	0,80	0,81	0,08	1,57

Abbildung C56 :

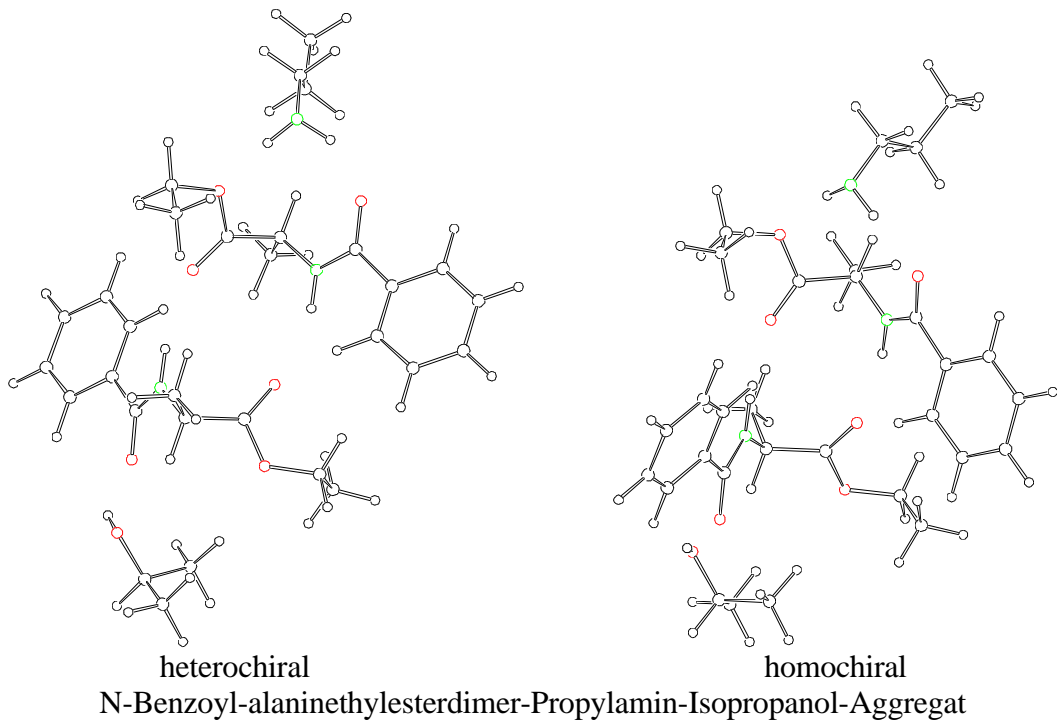


Tabelle C56 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
besr_e_1	-317,51	-245,53	-291,30	-199,61	-200,28	-219,29	-131,69	-173,47	-128,29	-178,21	-89,97	-105,54	-106,21	-67,97	-22,01
besr_e_2	-317,93	-245,49	-291,71	-199,46	-200,63	-219,29	-131,51	-173,33	-128,25	-178,53	-90,01	-105,39	-106,16	-67,98	-22,01
besr_e_3	-317,31	-245,50	-291,09	-199,50	-199,86	-219,29	-131,48	-173,35	-128,20	-177,75	-89,98	-105,35	-106,11	-67,95	-22,01
besr_e_4	-317,56	-245,52	-291,35	-199,64	-200,35	-219,29	-131,70	-173,51	-128,33	-178,29	-89,96	-105,55	-106,25	-67,96	-22,01
besr_z_1	-317,66	-245,62	-291,34	-199,54	-200,24	-219,29	-131,59	-173,29	-128,21	-178,18	-89,96	-105,34	-106,14	-67,96	-22,00
<b>besr_z_3</b>	<b>-318,01</b>	<b>-245,59</b>	<b>-291,70</b>	<b>-199,49</b>	<b>-200,57</b>	<b>-219,27</b>	<b>-131,56</b>	<b>-173,26</b>	<b>-128,22</b>	<b>-178,52</b>	<b>-89,97</b>	<b>-105,32</b>	<b>-106,15</b>	<b>-67,98</b>	<b>-22,00</b>
besr_z_4	-317,61	-245,63	-291,30	-199,50	-200,16	-219,29	-131,58	-173,26	-128,17	-178,10	-89,96	-105,33	-106,10	-67,97	-22,00
bess_e_1	-318,32	-246,37	-292,32	-199,65	-200,05	-220,35	-131,75	-173,69	-128,06	-178,05	-89,97	-105,77	-106,06	-67,97	-22,01
bess_e_2	-318,76	-246,33	-292,76	-199,68	-200,44	-220,32	-131,74	-173,72	-128,10	-178,45	-89,98	-105,77	-106,09	-67,98	-22,01
bess_e_3	-318,15	-246,35	-292,14	-199,71	-199,67	-220,32	-131,71	-173,74	-128,04	-177,68	-89,95	-105,74	-106,03	-67,95	-22,01
bess_e_4	-318,36	-246,36	-292,35	-199,68	-200,13	-220,34	-131,75	-173,71	-128,10	-178,12	-89,98	-105,78	-106,10	-67,97	-22,01
bess_z_1	-318,51	-246,56	-292,41	-199,79	-200,16	-220,43	-131,89	-173,85	-128,19	-178,06	-89,94	-105,93	-106,06	-67,97	-21,99
<b>bess_z_2</b>	<b>-318,97</b>	<b>-246,53</b>	<b>-292,84</b>	<b>-199,83</b>	<b>-200,58</b>	<b>-220,41</b>	<b>-131,88</b>	<b>-173,86</b>	<b>-128,22</b>	<b>-178,46</b>	<b>-89,98</b>	<b>-105,92</b>	<b>-106,10</b>	<b>-67,98</b>	<b>-21,99</b>
bess_z_3	-318,36	-246,54	-292,22	-199,87	-199,81	-220,41	-131,86	-173,88	-128,16	-177,68	-89,96	-105,88	-106,04	-67,95	-21,99
bess_z_4	-318,54	-246,56	-292,44	-199,81	-200,23	-220,42	-131,90	-173,87	-128,23	-178,13	-89,94	-105,93	-106,10	-67,97	-21,99

Fortsetzung Tabelle C56

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
besr_e_1	-15,78	-11,77	-11,58	-4,09	-4,09	-7,55	-4,14	0,03	-0,07	-4,03	0,01	-8,24	-7,61	-4,01	-4,20
besr_e_2	-16,38	-11,93	-12,18	-4,08	-4,47	-7,74	-4,11	0,04	-0,07	-4,38	-0,01	-8,63	-7,89	-4,45	-4,20
besr_e_3	-15,89	-12,04	-11,68	-4,18	-3,79	-7,84	-4,11	-0,05	-0,08	-3,69	-0,02	-8,04	-8,09	-3,86	-4,21
besr_e_4	-15,78	-11,71	-11,59	-4,12	-4,12	-7,49	-4,14	0,00	-0,07	-4,07	0,02	-8,31	-7,57	-4,07	-4,20
besr_z_1	-16,22	-12,14	-11,90	-4,24	-4,14	-7,81	-4,25	0,01	-0,07	-4,07	0,00	-8,41	-7,90	-4,08	-4,32
<b>besr_z_3</b>	<b>-16,56</b>	<b>-12,13</b>	<b>-12,25</b>	<b>-4,20</b>	<b>-4,44</b>	<b>-7,80</b>	<b>-4,24</b>	<b>0,04</b>	<b>-0,07</b>	<b>-4,39</b>	<b>0,01</b>	<b>-8,77</b>	<b>-7,93</b>	<b>-4,43</b>	<b>-4,31</b>
besr_z_4	-16,21	-12,19	-11,90	-4,20	-4,09	-7,86	-4,25	0,03	-0,07	-4,04	0,01	-8,36	-7,93	-4,02	-4,31
bess_e_1	-16,52	-12,53	-12,53	-3,90	-4,02	-8,52	-3,96	0,05	0,01	-4,03	0,01	-8,01	-8,52	-3,99	-3,99
bess_e_2	-16,90	-12,46	-12,92	-3,92	-4,36	-8,45	-3,96	0,03	0,01	-4,38	0,01	-8,46	-8,57	-4,45	-3,99
bess_e_3	-16,41	-12,56	-12,41	-4,01	-3,67	-8,55	-3,96	-0,05	0,01	-3,69	0,01	-7,87	-8,76	-3,85	-4,00
bess_e_4	-16,51	-12,48	-12,51	-3,92	-4,05	-8,46	-3,96	0,03	0,01	-4,06	0,00	-8,04	-8,48	-4,03	-4,00
bess_z_1	-16,57	-12,58	-12,46	-3,91	-4,14	-8,44	-3,98	0,05	-0,13	-4,03	0,02	-8,14	-8,56	-3,98	-4,11
<b>bess_z_2</b>	<b>-16,98</b>	<b>-12,52</b>	<b>-12,84</b>	<b>-3,94</b>	<b>-4,51</b>	<b>-8,39</b>	<b>-3,97</b>	<b>0,03</b>	<b>-0,13</b>	<b>-4,38</b>	<b>-0,01</b>	<b>-8,58</b>	<b>-8,63</b>	<b>-4,46</b>	<b>-4,13</b>
bess_z_3	-16,50	-12,63	-12,35	-4,04	-3,83	-8,49	-3,98	-0,04	-0,13	-3,69	-0,02	-8,00	-8,83	-3,87	-4,16
bess_z_4	-16,55	-12,53	-12,43	-3,92	-4,17	-8,39	-3,98	0,03	-0,13	-4,06	0,02	-8,18	-8,51	-4,02	-4,11
besr_e_1	-12,07	-9,63	-7,94	-1,08	-1,75	-5,47	-2,70	2,98	0,70	-1,76	1,65	1,37	0,70	0,07	1,57

Fortsetzung Tabelle C56

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
besr_e_2	-12,49	-9,59	-8,35	-0,93	-2,10	-5,47	-2,52	3,12	0,74	-2,08	1,61	1,52	0,75	0,07	1,56
besr_e_3	-11,87	-9,60	-7,73	-0,97	-1,33	-5,47	-2,49	3,10	0,79	-1,30	1,64	1,56	0,80	0,07	1,59
besr_e_4	-12,12	-9,62	-7,99	-1,11	-1,82	-5,47	-2,71	2,94	0,66	-1,84	1,66	1,36	0,66	0,07	1,58
besr_z_1	-12,22	-9,72	-7,98	-1,01	-1,71	-5,47	-2,60	3,16	0,78	-1,73	1,66	1,57	0,77	0,08	1,58
<b>besr_z_3</b>	<b>-12,57</b>	<b>-9,69</b>	<b>-8,34</b>	<b>-0,96</b>	<b>-2,04</b>	<b>-5,45</b>	<b>-2,57</b>	<b>3,19</b>	<b>0,77</b>	<b>-2,07</b>	<b>1,65</b>	<b>1,59</b>	<b>0,76</b>	<b>0,08</b>	<b>1,56</b>
besr_z_4	-12,17	-9,73	-7,94	-0,97	-1,63	-5,47	-2,59	3,19	0,82	-1,65	1,66	1,58	0,81	0,08	1,57
bess_e_1	-12,88	-10,47	-8,96	-1,12	-1,52	-6,53	-2,76	2,76	0,93	-1,60	1,65	1,14	0,85	0,07	1,57
bess_e_2	-13,32	-10,43	-9,40	-1,15	-1,91	-6,50	-2,75	2,73	0,89	-2,00	1,64	1,14	0,82	0,07	1,56
bess_e_3	-12,71	-10,45	-8,78	-1,18	-1,14	-6,50	-2,72	2,71	0,95	-1,23	1,67	1,17	0,88	0,07	1,59
bess_e_4	-12,92	-10,46	-8,99	-1,15	-1,60	-6,52	-2,76	2,74	0,89	-1,67	1,64	1,13	0,81	0,07	1,57
bess_z_1	-13,07	-10,66	-9,05	-1,26	-1,63	-6,61	-2,90	2,60	0,80	-1,61	1,68	0,98	0,85	0,09	1,57
<b>bess_z_2</b>	<b>-13,53</b>	<b>-10,63</b>	<b>-9,48</b>	<b>-1,30</b>	<b>-2,05</b>	<b>-6,59</b>	<b>-2,89</b>	<b>2,59</b>	<b>0,77</b>	<b>-2,01</b>	<b>1,64</b>	<b>0,99</b>	<b>0,81</b>	<b>0,09</b>	<b>1,56</b>
bess_z_3	-12,92	-10,64	-8,86	-1,34	-1,28	-6,59	-2,87	2,57	0,84	-1,23	1,66	1,03	0,87	0,09	1,59
bess_z_4	-13,10	-10,66	-9,08	-1,28	-1,70	-6,60	-2,91	2,58	0,76	-1,68	1,68	0,98	0,81	0,09	1,57

Abbildung C57 :

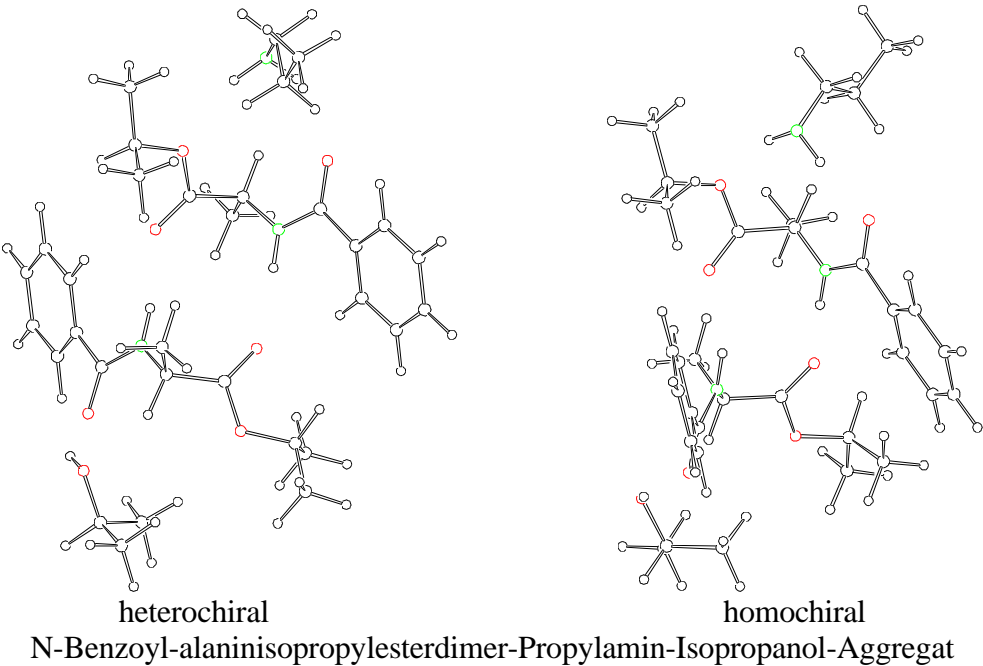


Tabelle C57 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
bisr_e_1	-326,28	-254,29	-299,70	-203,61	-203,91	-227,69	-135,66	-177,08	-131,92	-181,86	-89,98	-109,11	-109,86	-67,97	-22,02
<b>bisr_e_2</b>	<b>-326,79</b>	<b>-254,25</b>	<b>-300,17</b>	<b>-203,54</b>	<b>-204,38</b>	<b>-227,64</b>	<b>-135,65</b>	<b>-176,97</b>	<b>-131,86</b>	<b>-182,29</b>	<b>-89,99</b>	<b>-109,10</b>	<b>-109,79</b>	<b>-67,95</b>	<b>-22,03</b>
bisr_e_3	-326,02	-254,26	-299,41	-203,74	-203,52	-227,66	-135,64	-177,18	-131,97	-181,44	-90,02	-109,10	-109,90	-67,97	-22,02
bisr_e_4	-326,28	-254,30	-299,71	-203,62	-203,91	-227,69	-135,66	-177,09	-131,95	-181,86	-89,97	-109,11	-109,89	-67,96	-22,02
bisr_z_1	-326,37	-254,30	-299,96	-203,90	-203,95	-227,89	-135,83	-177,57	-131,99	-181,89	-89,96	-109,51	-109,94	-67,97	-21,99
bisr_z_2	-326,64	-254,01	-300,19	-204,00	-204,10	-227,56	-135,79	-177,64	-131,77	-182,04	-90,00	-109,45	-109,71	-68,00	-21,98
bisr_z_3	-326,76	-254,26	-300,36	-203,68	-204,36	-227,85	-135,82	-177,36	-131,86	-182,31	-89,93	-109,51	-109,81	-67,95	-21,99
bisr_z_4	-326,39	-254,30	-299,99	-203,83	-204,02	-227,90	-135,84	-177,52	-131,97	-181,97	-89,95	-109,52	-109,92	-67,96	-21,99
biss_e_1	-326,84	-254,87	-300,74	-203,72	-203,89	-228,74	-135,79	-177,68	-131,89	-181,87	-89,99	-109,74	-109,86	-67,97	-22,03
biss_e_2	-327,37	-254,83	-301,26	-203,67	-204,33	-228,71	-135,78	-177,61	-131,85	-182,32	-89,97	-109,72	-109,83	-67,95	-22,03
biss_e_3	-326,59	-254,83	-300,48	-203,87	-203,45	-228,72	-135,76	-177,82	-131,95	-181,44	-90,00	-109,72	-109,93	-67,97	-22,03
biss_e_4	-326,83	-254,87	-300,74	-203,74	-203,88	-228,75	-135,79	-177,71	-131,92	-181,87	-90,00	-109,74	-109,89	-67,97	-22,03
biss_z_1	-327,02	-255,06	-300,80	-203,77	-204,02	-228,81	-135,86	-177,71	-132,03	-181,87	-89,98	-109,77	-109,86	-67,97	-22,03
<b>biss_z_2</b>	<b>-327,57</b>	<b>-255,02</b>	<b>-301,32</b>	<b>-203,74</b>	<b>-204,50</b>	<b>-228,78</b>	<b>-135,84</b>	<b>-177,64</b>	<b>-132,00</b>	<b>-182,32</b>	<b>-89,99</b>	<b>-109,75</b>	<b>-109,83</b>	<b>-67,95</b>	<b>-22,03</b>
biss_z_3	-326,79	-255,02	-300,55	-203,94	-203,63	-228,79	-135,82	-177,85	-132,10	-181,45	-90,02	-109,75	-109,94	-67,97	-22,03
biss_z_4	-327,01	-255,06	-300,80	-203,80	-204,02	-228,82	-135,85	-177,74	-132,07	-181,87	-89,98	-109,77	-109,90	-67,97	-22,03

Fortsetzung Tabelle C57

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
bisr_e_1	-17,32	-13,30	-12,77	-4,51	-4,06	-8,72	-4,53	0,00	-0,04	-4,03	0,02	-8,61	-8,76	-4,02	-4,55
<b>bisr_e_2</b>	<b>-17,92</b>	<b>-13,33</b>	<b>-13,33</b>	<b>-4,47</b>	<b>-4,62</b>	<b>-8,75</b>	<b>-4,52</b>	<b>0,08</b>	<b>-0,04</b>	<b>-4,55</b>	<b>-0,02</b>	<b>-9,15</b>	<b>-8,85</b>	<b>-4,60</b>	<b>-4,59</b>
bisr_e_3	-17,02	-13,23	-12,43	-4,65	-3,62	-8,66	-4,52	-0,11	-0,04	-3,56	-0,02	-8,35	-8,94	-3,79	-4,59
bisr_e_4	-17,30	-13,27	-12,75	-4,52	-4,03	-8,69	-4,53	-0,02	-0,04	-4,01	0,02	-8,62	-8,76	-4,02	-4,55
bisr_z_1	-16,97	-12,87	-12,54	-4,44	-4,05	-8,44	-4,34	-0,10	-0,07	-3,98	-0,01	-8,52	-8,65	-4,10	-4,43
bisr_z_2	-17,50	-12,86	-13,03	-4,56	-4,40	-8,40	-4,36	-0,19	-0,08	-4,32	-0,01	-9,09	-8,82	-4,63	-4,47
bisr_z_3	-17,51	-12,96	-13,10	-4,23	-4,61	-8,54	-4,33	0,09	-0,07	-4,56	0,01	-8,98	-8,62	-4,56	-4,41
bisr_z_4	-16,99	-12,87	-12,59	-4,36	-4,15	-8,45	-4,33	-0,03	-0,06	-4,09	0,00	-8,54	-8,57	-4,12	-4,40
biss_e_1	-17,25	-13,24	-13,18	-3,99	-4,03	-9,15	-4,02	0,02	0,00	-4,04	0,00	-8,10	-9,18	-4,01	-4,07
biss_e_2	-17,84	-13,25	-13,76	-3,97	-4,53	-9,16	-4,03	0,06	0,00	-4,54	0,01	-8,69	-9,27	-4,59	-4,08
biss_e_3	-16,94	-13,15	-12,86	-4,15	-3,53	-9,07	-4,01	-0,13	0,00	-3,54	0,00	-7,87	-9,38	-3,79	-4,07
biss_e_4	-17,20	-13,21	-13,14	-4,01	-3,99	-9,12	-4,02	0,00	0,00	-4,00	0,00	-8,08	-9,18	-3,99	-4,07
biss_z_1	-17,38	-13,39	-13,20	-4,00	-4,15	-9,17	-4,05	0,02	-0,14	-4,04	0,02	-8,23	-9,29	-3,99	-4,18
<b>biss_z_2</b>	<b>-18,00</b>	<b>-13,40</b>	<b>-13,78</b>	<b>-4,00</b>	<b>-4,68</b>	<b>-9,19</b>	<b>-4,06</b>	<b>0,06</b>	<b>-0,13</b>	<b>-4,54</b>	<b>-0,01</b>	<b>-8,80</b>	<b>-9,41</b>	<b>-4,60</b>	<b>-4,22</b>
biss_z_3	-17,10	-13,30	-12,89	-4,19	-3,69	-9,10	-4,04	-0,13	-0,13	-3,54	-0,02	-7,98	-9,53	-3,80	-4,21
biss_z_4	-17,34	-13,36	-13,16	-4,02	-4,11	-9,15	-4,05	0,00	-0,14	-4,00	0,02	-8,21	-9,29	-3,98	-4,18

Fortsetzung Tabelle C57

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
bisr_e_1	-12,92	-10,47	-8,42	-1,12	-1,42	-5,95	-2,71	3,33	1,03	-1,45	1,64	1,76	1,01	0,06	1,57
<b>bisr_e_2</b>	<b>-13,43</b>	<b>-10,43</b>	<b>-8,89</b>	<b>-1,05</b>	<b>-1,89</b>	<b>-5,90</b>	<b>-2,70</b>	<b>3,44</b>	<b>1,09</b>	<b>-1,88</b>	<b>1,63</b>	<b>1,77</b>	<b>1,08</b>	<b>0,05</b>	<b>1,59</b>
bisr_e_3	-12,66	-10,44	-8,13	-1,25	-1,03	-5,92	-2,69	3,23	0,98	-1,03	1,60	1,77	0,97	0,06	1,57
bisr_e_4	-12,92	-10,48	-8,43	-1,13	-1,42	-5,95	-2,71	3,32	1,00	-1,45	1,65	1,76	0,98	0,06	1,58
bisr_z_1	-13,01	-10,48	-8,68	-1,41	-1,46	-6,15	-2,88	2,84	0,96	-1,48	1,66	1,36	0,93	0,09	1,57
bisr_z_2	-13,28	-10,19	-8,91	-1,51	-1,61	-5,82	-2,84	2,77	1,18	-1,63	1,62	1,42	1,16	0,10	1,54
bisr_z_3	-13,40	-10,44	-9,08	-1,19	-1,87	-6,11	-2,87	3,05	1,09	-1,90	1,69	1,36	1,06	0,09	1,59
bisr_z_4	-13,03	-10,48	-8,71	-1,34	-1,53	-6,16	-2,89	2,89	0,98	-1,56	1,67	1,35	0,95	0,09	1,58
biss_e_1	-13,48	-11,05	-9,46	-1,23	-1,40	-7,00	-2,84	2,73	1,06	-1,46	1,63	1,13	1,01	0,05	1,57
biss_e_2	-14,01	-11,01	-9,98	-1,18	-1,84	-6,97	-2,83	2,80	1,10	-1,91	1,65	1,15	1,04	0,05	1,59
biss_e_3	-13,23	-11,01	-9,20	-1,38	-0,96	-6,98	-2,81	2,59	1,00	-1,03	1,62	1,15	0,94	0,05	1,57
biss_e_4	-13,47	-11,05	-9,46	-1,25	-1,39	-7,01	-2,84	2,70	1,03	-1,46	1,62	1,13	0,98	0,05	1,57
biss_z_1	-13,66	-11,24	-9,52	-1,28	-1,53	-7,07	-2,91	2,70	0,92	-1,46	1,64	1,10	1,01	0,05	1,57
<b>biss_z_2</b>	<b>-14,21</b>	<b>-11,20</b>	<b>-10,04</b>	<b>-1,25</b>	<b>-2,01</b>	<b>-7,04</b>	<b>-2,89</b>	<b>2,77</b>	<b>0,95</b>	<b>-1,91</b>	<b>1,63</b>	<b>1,12</b>	<b>1,04</b>	<b>0,05</b>	<b>1,59</b>
biss_z_3	-13,43	-11,20	-9,27	-1,45	-1,14	-7,05	-2,87	2,56	0,85	-1,04	1,60	1,12	0,93	0,05	1,57
biss_z_4	-13,65	-11,24	-9,52	-1,31	-1,53	-7,08	-2,90	2,67	0,88	-1,46	1,64	1,10	0,97	0,05	1,57

Abbildung C58 :

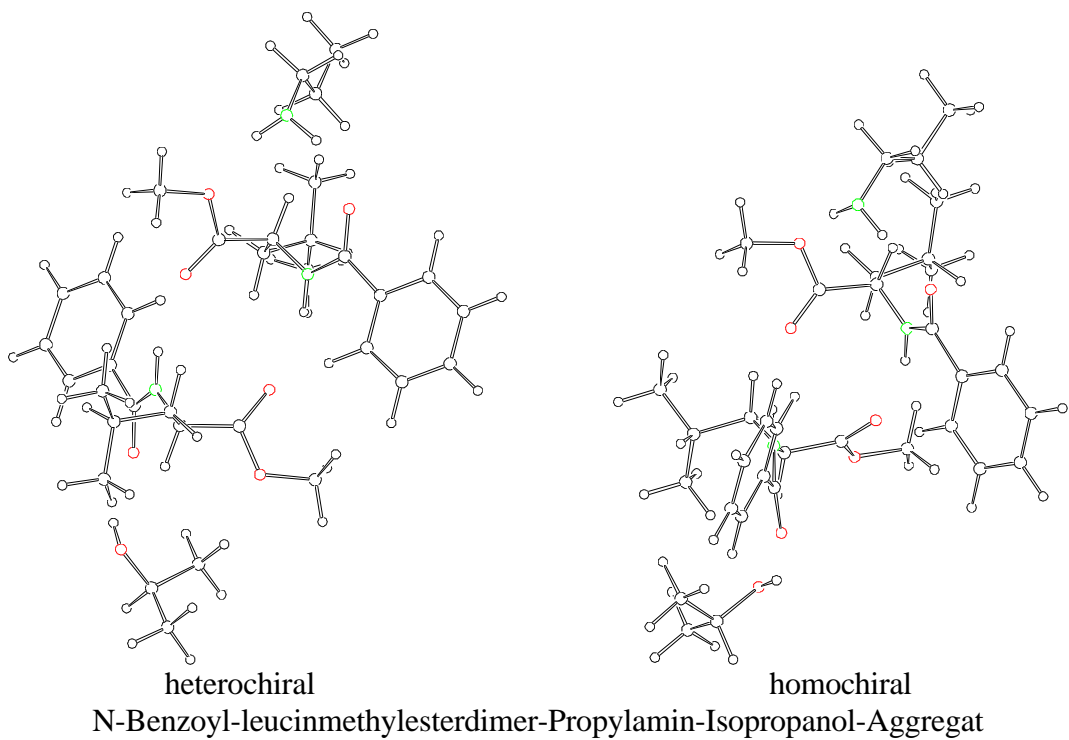


Tabelle C58 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
blsr_e_1	-340,43	-268,10	-314,33	-210,79	-211,96	-241,98	-142,86	-184,73	-139,63	-189,93	-89,97	-116,78	-117,58	-67,97	-22,01
blsr_e_2	-339,79	-268,13	-313,67	-210,98	-211,06	-241,99	-142,81	-184,90	-139,64	-189,02	-90,01	-116,72	-117,60	-68,01	-22,01
blsr_e_3	-340,96	-268,10	-314,83	-210,76	-212,40	-241,97	-142,82	-184,68	-139,54	-190,34	-90,02	-116,74	-117,49	-68,00	-22,01
blsr_e_4	-340,15	-268,16	-314,05	-210,76	-211,63	-242,04	-142,85	-184,70	-139,63	-189,59	-89,97	-116,77	-117,58	-67,97	-22,01
blsr_z_1	-340,89	-268,55	-314,35	-211,18	-211,96	-242,00	-143,24	-184,72	-139,62	-189,91	-89,95	-116,77	-117,57	-67,97	-21,99
blsr_z_2	-340,25	-268,58	-313,69	-211,38	-211,05	-242,01	-143,19	-184,88	-139,63	-189,01	-90,00	-116,70	-117,58	-68,01	-21,98
<b>blsr_z_3</b>	<b>-341,40</b>	<b>-268,55</b>	<b>-314,85</b>	<b>-211,14</b>	<b>-212,36</b>	<b>-241,98</b>	<b>-143,20</b>	<b>-184,66</b>	<b>-139,53</b>	<b>-190,33</b>	<b>-89,97</b>	<b>-116,72</b>	<b>-117,47</b>	<b>-68,00</b>	<b>-21,98</b>
blsr_z_4	-340,60	-268,62	-314,07	-211,14	-211,61	-242,06	-143,23	-184,69	-139,62	-189,57	-89,94	-116,76	-117,56	-67,97	-21,99
blss_e_1	-340,51	-268,45	-314,56	-210,95	-211,84	-242,48	-143,04	-185,03	-139,77	-189,83	-89,97	-117,10	-117,76	-67,95	-22,02
blss_e_2	-340,95	-268,27	-315,03	-210,95	-211,99	-242,33	-142,96	-185,05	-139,40	-190,00	-90,00	-117,05	-117,39	-67,98	-22,02
blss_e_3	-341,22	-268,56	-315,29	-210,84	-211,83	-242,62	-142,80	-184,91	-139,36	-189,86	-89,99	-116,87	-117,37	-67,97	-22,02
blss_e_4	-340,77	-268,49	-314,82	-210,88	-211,80	-242,53	-142,98	-184,95	-139,48	-189,80	-89,99	-117,04	-117,48	-67,97	-22,02
blss_z_1	-340,99	-268,90	-314,59	-211,36	-211,91	-242,48	-143,44	-185,08	-139,83	-189,82	-89,93	-117,14	-117,73	-67,95	-21,99
blss_z_2	-341,41	-268,71	-315,17	-211,34	-212,11	-242,47	-143,34	-185,22	-139,49	-189,99	-89,99	-117,22	-117,38	-67,99	-21,99
<b>blss_z_3</b>	<b>-341,69</b>	<b>-269,00</b>	<b>-315,44</b>	<b>-211,22</b>	<b>-211,95</b>	<b>-242,76</b>	<b>-143,17</b>	<b>-185,10</b>	<b>-139,42</b>	<b>-189,82</b>	<b>-89,98</b>	<b>-117,07</b>	<b>-117,31</b>	<b>-67,97</b>	<b>-21,99</b>
blss_z_4	-341,21	-268,95	-314,93	-211,26	-211,88	-242,64	-143,36	-185,11	-139,58	-189,79	-89,94	-117,20	-117,47	-67,97	-21,99

Fortsetzung Tabelle C58

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
blsr_e_1	-16,09	-11,72	-12,00	-4,03	-4,40	-7,61	-4,06	0,02	-0,04	-4,38	0,01	-8,49	-7,65	-4,36	-4,09
blsr_e_2	-15,46	-11,81	-11,34	-4,25	-3,44	-7,68	-4,08	-0,17	-0,04	-3,41	0,01	-7,79	-7,97	-3,65	-4,12
blsr_e_3	-16,72	-11,85	-12,61	-4,02	-4,90	-7,74	-4,07	0,06	-0,04	-4,85	-0,01	-8,97	-7,80	-4,87	-4,12
blsr_e_4	-15,82	-11,80	-11,73	-4,01	-4,07	-7,69	-4,07	0,04	-0,04	-4,04	0,01	-8,13	-7,71	-4,02	-4,09
blsr_z_1	-16,59	-12,23	-12,04	-4,45	-4,44	-7,66	-4,48	0,02	-0,07	-4,38	0,01	-8,94	-7,73	-4,37	-4,55
blsr_z_2	-15,98	-12,31	-11,39	-4,68	-3,48	-7,73	-4,51	-0,16	-0,07	-3,41	-0,01	-8,24	-8,06	-3,66	-4,59
<b>blsr_z_3</b>	<b>-17,23</b>	<b>-12,37</b>	<b>-12,67</b>	<b>-4,44</b>	<b>-4,91</b>	<b>-7,79</b>	<b>-4,50</b>	<b>0,05</b>	<b>-0,07</b>	<b>-4,86</b>	<b>0,01</b>	<b>-9,45</b>	<b>-7,88</b>	<b>-4,86</b>	<b>-4,56</b>
blsr_z_4	-16,32	-12,30	-11,77	-4,43	-4,09	-7,74	-4,48	0,04	-0,07	-4,04	0,01	-8,59	-7,79	-4,01	-4,54
blss_e_1	-15,68	-11,57	-11,75	-3,88	-4,11	-7,62	-3,92	0,03	0,00	-4,13	0,00	-8,06	-7,63	-4,11	-3,93
blss_e_2	-16,50	-11,80	-12,61	-3,90	-4,60	-7,89	-3,89	-0,01	0,01	-4,62	0,01	-8,62	-7,99	-4,70	-3,90
blss_e_3	-16,98	-12,30	-13,07	-3,97	-4,47	-8,38	-3,91	-0,07	0,03	-4,51	0,01	-8,61	-8,55	-4,68	-3,91
blss_e_4	-16,27	-11,96	-12,33	-3,86	-4,33	-8,01	-3,92	0,05	0,01	-4,35	0,00	-8,25	-7,99	-4,30	-3,93
blss_z_1	-16,18	-12,05	-11,77	-4,29	-4,25	-7,61	-4,31	0,01	-0,12	-4,14	0,01	-8,58	-7,73	-4,14	-4,41
blss_z_2	-16,83	-12,11	-12,58	-4,14	-4,75	-7,86	-4,13	-0,01	-0,11	-4,62	-0,01	-8,96	-8,08	-4,72	-4,25
<b>blss_z_3</b>	<b>-17,35</b>	<b>-12,63</b>	<b>-13,08</b>	<b>-4,18</b>	<b>-4,67</b>	<b>-8,38</b>	<b>-4,11</b>	<b>-0,06</b>	<b>-0,12</b>	<b>-4,54</b>	<b>-0,02</b>	<b>-8,95</b>	<b>-8,70</b>	<b>-4,72</b>	<b>-4,26</b>
blss_z_4	-16,58	-12,29	-12,29	-4,10	-4,44	-7,98	-4,18	0,05	-0,11	-4,35	0,02	-8,62	-8,05	-4,29	-4,28

Fortsetzung Tabelle C58

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
blsr_e_1	-12,05	-9,26	-8,03	-0,79	-1,96	-5,22	-2,40	3,19	0,83	-2,01	1,65	1,60	0,80	0,07	1,57
blsr_e_2	-11,41	-9,29	-7,37	-0,98	-1,06	-5,23	-2,35	3,02	0,82	-1,10	1,61	1,66	0,78	0,07	1,53
blsr_e_3	-12,58	-9,26	-8,53	-0,76	-2,40	-5,21	-2,36	3,24	0,92	-2,42	1,60	1,64	0,89	0,07	1,54
blsr_e_4	-11,77	-9,32	-7,75	-0,76	-1,63	-5,28	-2,39	3,22	0,83	-1,67	1,65	1,61	0,80	0,07	1,57
blsr_z_1	-12,51	-9,71	-8,05	-1,18	-1,96	-5,24	-2,78	3,20	0,84	-1,99	1,67	1,61	0,81	0,09	1,57
blsr_z_2	-11,87	-9,74	-7,39	-1,38	-1,05	-5,25	-2,73	3,04	0,83	-1,09	1,62	1,68	0,80	0,10	1,53
<b>blsr_z_3</b>	<b>-13,02</b>	<b>-9,71</b>	<b>-8,55</b>	<b>-1,14</b>	<b>-2,36</b>	<b>-5,22</b>	<b>-2,74</b>	<b>3,26</b>	<b>0,93</b>	<b>-2,41</b>	<b>1,65</b>	<b>1,66</b>	<b>0,91</b>	<b>0,10</b>	<b>1,54</b>
blsr_z_4	-12,22	-9,78	-7,77	-1,14	-1,61	-5,30	-2,77	3,23	0,84	-1,65	1,68	1,62	0,82	0,09	1,57
blss_e_1	-12,13	-9,61	-8,26	-0,95	-1,84	-5,72	-2,58	2,89	0,69	-1,91	1,65	1,28	0,62	0,06	1,59
blss_e_2	-12,57	-9,43	-8,73	-0,95	-1,99	-5,57	-2,50	2,87	1,06	-2,08	1,62	1,33	0,99	0,06	1,56
blss_e_3	-12,84	-9,72	-8,99	-0,84	-1,83	-5,86	-2,34	3,01	1,10	-1,94	1,63	1,51	1,01	0,06	1,57
blss_e_4	-12,39	-9,65	-8,52	-0,88	-1,80	-5,77	-2,52	2,97	0,98	-1,88	1,63	1,34	0,90	0,06	1,57
blss_z_1	-12,61	-10,06	-8,29	-1,36	-1,91	-5,72	-2,98	2,84	0,63	-1,90	1,69	1,24	0,65	0,09	1,59
blss_z_2	-13,03	-9,87	-8,87	-1,34	-2,11	-5,71	-2,88	2,70	0,97	-2,07	1,63	1,16	1,00	0,09	1,55
<b>blss_z_3</b>	<b>-13,31</b>	<b>-10,16</b>	<b>-9,14</b>	<b>-1,22</b>	<b>-1,95</b>	<b>-6,00</b>	<b>-2,71</b>	<b>2,82</b>	<b>1,04</b>	<b>-1,90</b>	<b>1,64</b>	<b>1,31</b>	<b>1,07</b>	<b>0,09</b>	<b>1,57</b>
blss_z_4	-12,83	-10,11	-8,63	-1,26	-1,88	-5,88	-2,90	2,81	0,88	-1,87	1,68	1,18	0,91	0,09	1,57



Abbildung C59 :

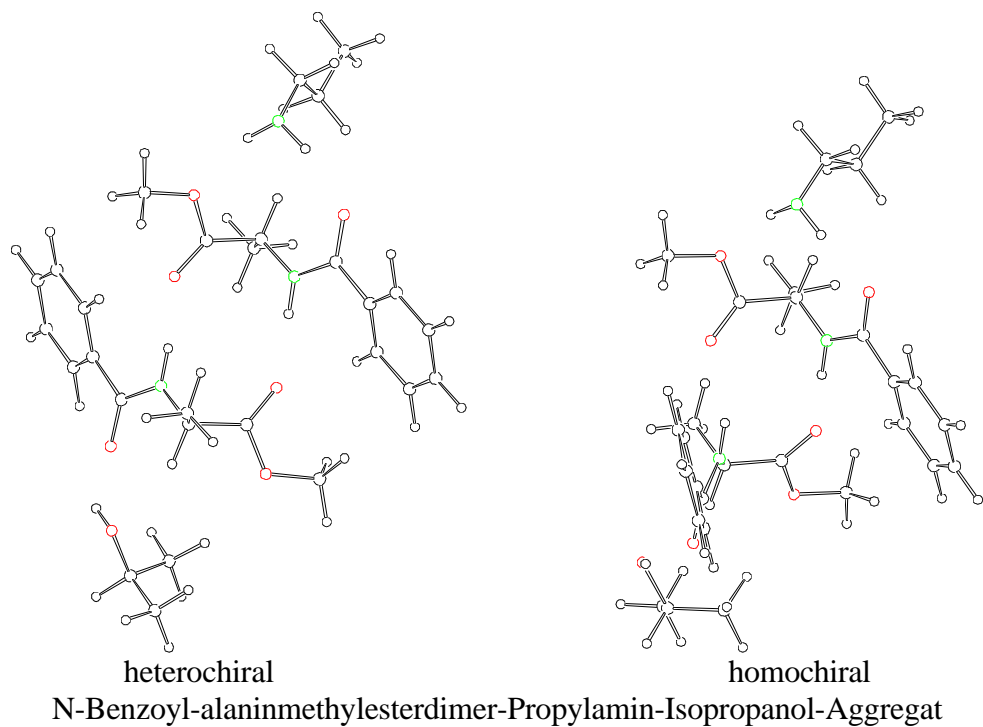


Tabelle C59 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
bmsr_e_1	-305,83	-233,79	-279,98	-193,32	-194,10	-207,92	-125,35	-167,47	-122,09	-172,10	-89,96	-99,48	-100,07	-67,96	-22,02
bmsr_e_2	-306,25	-233,76	-280,35	-193,20	-194,51	-207,89	-125,33	-167,32	-122,01	-172,47	-89,99	-99,47	-100,00	-67,96	-22,01
bmsr_e_3	-305,50	-233,76	-279,61	-193,41	-193,66	-207,88	-125,32	-167,54	-122,11	-171,62	-90,00	-99,46	-100,09	-67,97	-22,01
bmsr_e_4	-305,75	-233,80	-279,91	-193,30	-194,01	-207,92	-125,34	-167,46	-122,08	-172,01	-89,96	-99,48	-100,06	-67,96	-22,01
bmsr_z_1	-306,13	-234,08	-280,14	-193,58	-194,18	-208,07	-125,60	-167,66	-122,16	-172,10	-89,97	-99,67	-100,08	-67,96	-22,02
<b>bmsr_z_2</b>	<b>-306,52</b>	<b>-234,05</b>	<b>-280,51</b>	<b>-193,44</b>	<b>-194,56</b>	<b>-208,03</b>	<b>-125,58</b>	<b>-167,50</b>	<b>-122,09</b>	<b>-172,48</b>	<b>-89,97</b>	<b>-99,64</b>	<b>-100,00</b>	<b>-67,96</b>	<b>-22,01</b>
bmsr_z_3	-305,79	-234,04	-279,78	-193,67	-193,72	-208,04	-125,57	-167,73	-122,18	-171,63	-89,99	-99,65	-100,09	-67,97	-22,01
bmsr_z_4	-306,05	-234,08	-280,06	-193,56	-194,09	-208,07	-125,60	-167,65	-122,15	-172,02	-89,97	-99,67	-100,06	-67,96	-22,01
bmss_e_1	-305,98	-234,04	-280,24	-193,30	-194,00	-208,27	-125,38	-167,57	-122,02	-172,01	-89,98	-99,63	-100,02	-67,97	-22,02
bmss_e_2	-306,50	-234,01	-280,77	-193,24	-194,45	-208,26	-125,35	-167,52	-122,01	-172,46	-89,97	-99,63	-100,01	-67,95	-22,02
bmss_e_3	-305,77	-234,00	-280,02	-193,45	-193,61	-208,25	-125,34	-167,72	-122,10	-171,62	-89,99	-99,61	-100,10	-67,97	-22,02
bmss_e_4	-305,97	-234,04	-280,22	-193,32	-193,99	-208,26	-125,38	-167,58	-122,06	-172,01	-89,99	-99,63	-100,06	-67,97	-22,02
bmss_z_1	-306,37	-234,45	-280,52	-193,52	-194,11	-208,56	-125,62	-167,81	-122,14	-171,98	-89,96	-99,88	-99,99	-67,97	-22,02
<b>bmss_z_2</b>	<b>-306,92</b>	<b>-234,41</b>	<b>-281,05</b>	<b>-193,49</b>	<b>-194,60</b>	<b>-208,55</b>	<b>-125,60</b>	<b>-167,77</b>	<b>-122,14</b>	<b>-172,44</b>	<b>-89,98</b>	<b>-99,88</b>	<b>-99,99</b>	<b>-67,95</b>	<b>-22,02</b>
bmss_z_3	-306,19	-234,40	-280,31	-193,71	-193,77	-208,54	-125,58	-167,97	-122,23	-171,60	-90,01	-99,87	-100,08	-67,97	-22,02
bmss_z_4	-306,37	-234,45	-280,51	-193,55	-194,10	-208,56	-125,61	-167,84	-122,18	-171,97	-89,97	-99,88	-100,02	-67,97	-22,02

Fortsetzung Tabelle C59

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
bmsr_e_1	-16,31	-12,23	-12,47	-3,86	-4,05	-8,36	-3,85	-0,03	0,00	-4,07	0,01	-7,96	-8,39	-4,08	-3,84
bmsr_e_2	-16,81	-12,28	-12,93	-3,76	-4,54	-8,42	-3,85	0,11	0,00	-4,52	-0,02	-8,37	-8,44	-4,53	-3,88
bmsr_e_3	-15,96	-12,19	-12,09	-3,97	-3,58	-8,33	-3,84	-0,11	0,00	-3,56	-0,01	-7,62	-8,56	-3,78	-3,88
bmsr_e_4	-16,24	-12,25	-12,41	-3,85	-3,97	-8,38	-3,85	-0,02	0,00	-3,99	0,02	-7,87	-8,40	-3,99	-3,83
bmsr_z_1	-16,41	-12,32	-12,43	-3,94	-4,13	-8,33	-3,92	-0,03	-0,07	-4,07	0,00	-8,08	-8,42	-4,09	-3,98
<b>bmsr_z_2</b>	<b>-16,90</b>	<b>-12,39</b>	<b>-12,91</b>	<b>-3,82</b>	<b>-4,58</b>	<b>-8,39</b>	<b>-3,92</b>	<b>0,10</b>	<b>-0,07</b>	<b>-4,52</b>	<b>0,01</b>	<b>-8,52</b>	<b>-8,46</b>	<b>-4,51</b>	<b>-4,00</b>
bmsr_z_3	-16,07	-12,29	-12,07	-4,03	-3,64	-8,30	-3,91	-0,11	-0,07	-3,57	-0,01	-7,76	-8,59	-3,78	-4,00
bmsr_z_4	-16,34	-12,34	-12,37	-3,92	-4,06	-8,34	-3,92	-0,02	-0,07	-4,00	0,01	-8,01	-8,43	-4,00	-3,97
bmss_e_1	-16,35	-12,37	-12,62	-3,68	-4,00	-8,62	-3,73	0,03	0,02	-4,02	0,00	-7,73	-8,60	-3,98	-3,73
bmss_e_2	-16,89	-12,34	-13,18	-3,63	-4,47	-8,62	-3,70	0,07	0,02	-4,50	0,00	-8,27	-8,69	-4,54	-3,71
bmss_e_3	-16,06	-12,26	-12,34	-3,84	-3,52	-8,54	-3,70	-0,14	0,02	-3,55	0,00	-7,53	-8,81	-3,80	-3,72
bmss_e_4	-16,30	-12,34	-12,57	-3,71	-3,95	-8,58	-3,73	0,01	0,02	-3,98	0,00	-7,72	-8,59	-3,96	-3,74
bmss_z_1	-16,52	-12,56	-12,69	-3,66	-4,14	-8,69	-3,72	0,04	-0,14	-4,02	0,02	-7,86	-8,78	-3,96	-3,84
<b>bmss_z_2</b>	<b>-17,08</b>	<b>-12,52</b>	<b>-13,23</b>	<b>-3,64</b>	<b>-4,65</b>	<b>-8,68</b>	<b>-3,70</b>	<b>0,07</b>	<b>-0,14</b>	<b>-4,50</b>	<b>-0,01</b>	<b>-8,40</b>	<b>-8,88</b>	<b>-4,56</b>	<b>-3,85</b>
bmss_z_3	-16,27	-12,45	-12,40	-3,86	-3,71	-8,60	-3,70	-0,14	-0,13	-3,55	-0,02	-7,65	-9,01	-3,82	-3,87
bmss_z_4	-16,47	-12,53	-12,64	-3,68	-4,09	-8,66	-3,72	0,01	-0,14	-3,97	0,02	-7,83	-8,78	-3,94	-3,84

Fortsetzung Tabelle C59

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
bmsr_e_1	-12,27	-9,77	-8,50	-0,73	-1,51	-5,98	-2,30	3,04	0,96	-1,59	1,66	1,49	0,90	0,06	1,58
bmsr_e_2	-12,69	-9,74	-8,87	-0,61	-1,92	-5,95	-2,28	3,19	1,04	-1,96	1,63	1,50	0,97	0,07	1,58
bmsr_e_3	-11,94	-9,74	-8,13	-0,82	-1,07	-5,94	-2,27	2,97	0,94	-1,11	1,62	1,51	0,88	0,07	1,57
bmsr_e_4	-12,19	-9,78	-8,43	-0,71	-1,42	-5,98	-2,29	3,05	0,97	-1,50	1,66	1,49	0,91	0,07	1,58
bmsr_z_1	-12,57	-10,06	-8,66	-0,99	-1,59	-6,13	-2,55	2,85	0,89	-1,59	1,65	1,30	0,89	0,06	1,58
<b>bmsr_z_2</b>	<b>-12,96</b>	<b>-10,03</b>	<b>-9,03</b>	<b>-0,85</b>	<b>-1,97</b>	<b>-6,09</b>	<b>-2,53</b>	<b>3,01</b>	<b>0,96</b>	<b>-1,97</b>	<b>1,65</b>	<b>1,33</b>	<b>0,97</b>	<b>0,07</b>	<b>1,58</b>
bmsr_z_3	-12,23	-10,02	-8,30	-1,08	-1,13	-6,10	-2,52	2,78	0,87	-1,12	1,63	1,32	0,88	0,07	1,57
bmsr_z_4	-12,49	-10,06	-8,58	-0,97	-1,50	-6,13	-2,55	2,86	0,90	-1,51	1,65	1,30	0,91	0,07	1,58
bmss_e_1	-12,42	-10,02	-8,76	-0,71	-1,41	-6,33	-2,33	2,94	1,03	-1,50	1,64	1,34	0,95	0,06	1,57
bmss_e_2	-12,94	-9,99	-9,29	-0,65	-1,86	-6,32	-2,30	2,99	1,04	-1,95	1,65	1,34	0,96	0,06	1,59
bmss_e_3	-12,21	-9,98	-8,54	-0,86	-1,02	-6,31	-2,29	2,79	0,95	-1,11	1,63	1,36	0,87	0,06	1,57
bmss_e_4	-12,41	-10,02	-8,74	-0,73	-1,40	-6,32	-2,33	2,93	0,99	-1,50	1,63	1,34	0,91	0,06	1,57
bmss_z_1	-12,81	-10,43	-9,04	-0,93	-1,52	-6,62	-2,57	2,70	0,91	-1,47	1,66	1,09	0,98	0,06	1,57
<b>bmss_z_2</b>	<b>-13,36</b>	<b>-10,39</b>	<b>-9,57</b>	<b>-0,90</b>	<b>-2,01</b>	<b>-6,61</b>	<b>-2,55</b>	<b>2,74</b>	<b>0,91</b>	<b>-1,93</b>	<b>1,64</b>	<b>1,09</b>	<b>0,98</b>	<b>0,06</b>	<b>1,59</b>
bmss_z_3	-12,63	-10,38	-8,83	-1,12	-1,18	-6,60	-2,53	2,54	0,82	-1,09	1,61	1,10	0,89	0,06	1,57
bmss_z_4	-12,81	-10,43	-9,03	-0,96	-1,51	-6,62	-2,56	2,67	0,87	-1,46	1,65	1,09	0,95	0,06	1,57

Abbildung C60

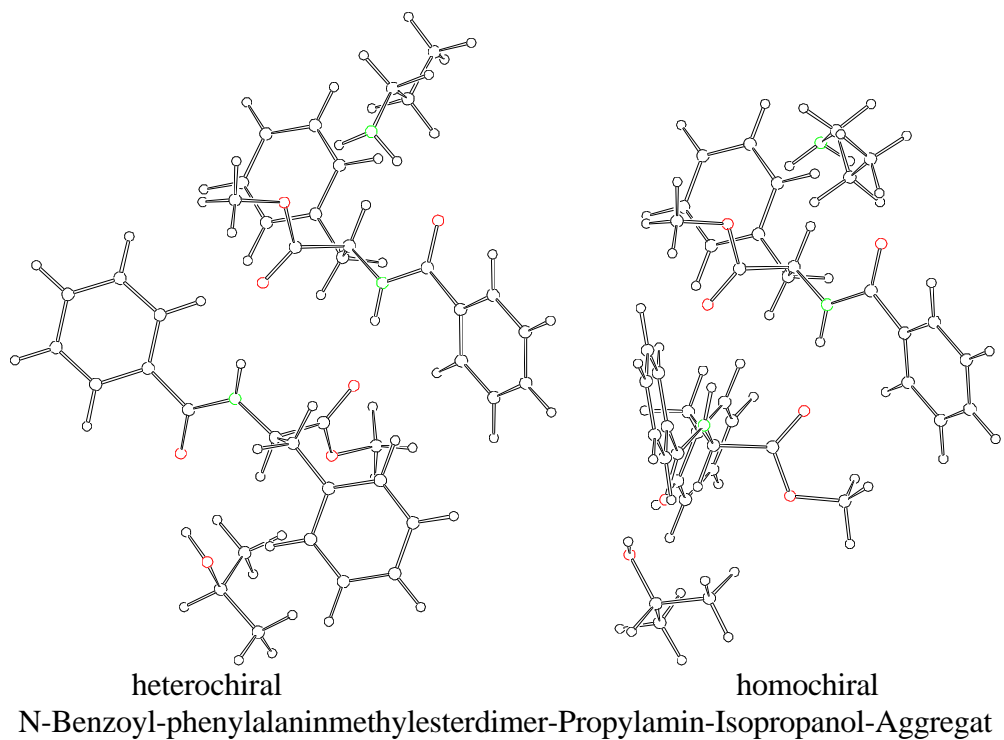


Tabelle C60 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
bpsr_e_1	-250,45	-178,38	-224,66	-165,68	-166,36	-152,57	-97,69	-139,97	-94,31	-144,29	-89,99	-71,96	-72,22	-67,98	-22,03
bpsr_e_2	-251,47	-178,06	-225,65	-165,68	-167,48	-152,27	-97,68	-139,95	-94,22	-145,37	-90,01	-71,97	-72,13	-67,97	-22,03
bpsr_e_3	-251,08	-178,28	-225,26	-165,75	-166,87	-152,47	-97,68	-140,01	-94,29	-144,76	-90,01	-71,96	-72,20	-67,97	-22,03
bpsr_e_4	-250,57	-178,33	-224,78	-165,61	-166,58	-152,52	-97,70	-139,90	-94,30	-144,50	-89,98	-71,97	-72,21	-67,96	-22,03
bpsr_z_1	-250,67	-178,60	-224,69	-165,91	-166,38	-152,59	-97,92	-140,00	-94,32	-144,30	-90,00	-71,99	-72,23	-67,98	-22,03
<b>bpsr_z_2</b>	<b>-251,67</b>	<b>-178,28</b>	<b>-225,69</b>	<b>-165,90</b>	<b>-167,47</b>	<b>-152,29</b>	<b>-97,92</b>	<b>-140,00</b>	<b>-94,24</b>	<b>-145,38</b>	<b>-89,99</b>	<b>-72,01</b>	<b>-72,14</b>	<b>-67,97</b>	<b>-22,03</b>
bpsr_z_3	-251,28	-178,49	-225,29	-165,97	-166,86	-152,50	-97,91	-140,05	-94,30	-144,77	-89,99	-72,00	-72,20	-67,97	-22,03
bpsr_z_4	-250,79	-178,54	-224,81	-165,84	-166,60	-152,54	-97,93	-139,93	-94,32	-144,51	-89,98	-72,01	-72,21	-67,96	-22,03
bpss_e_1	-250,96	-179,04	-225,20	-165,61	-165,99	-153,28	-97,59	-139,91	-94,16	-143,92	-89,97	-71,90	-72,10	-67,94	-22,03
<b>bpss_e_2</b>	<b>-252,52</b>	<b>-178,89</b>	<b>-226,74</b>	<b>-165,54</b>	<b>-167,37</b>	<b>-153,09</b>	<b>-97,61</b>	<b>-139,84</b>	<b>-93,84</b>	<b>-145,32</b>	<b>-89,98</b>	<b>-71,90</b>	<b>-71,76</b>	<b>-67,97</b>	<b>-22,03</b>
bpss_e_3	-251,31	-178,39	-225,55	-165,66	-166,71	-152,61	-97,64	-139,96	-94,00	-144,65	-89,98	-71,94	-71,92	-67,96	-22,03
bpss_e_4	-251,01	-179,04	-225,24	-165,64	-166,06	-153,28	-97,59	-139,93	-94,16	-143,98	-90,01	-71,90	-72,09	-67,97	-22,03
bpss_z_1	-251,22	-179,32	-225,23	-165,83	-166,06	-153,31	-97,82	-139,95	-94,25	-143,93	-89,95	-71,93	-72,10	-67,94	-22,02
bpss_z_2	-252,26	-178,59	-226,25	-165,82	-167,33	-152,59	-97,84	-139,94	-93,76	-145,17	-90,02	-71,96	-71,61	-67,98	-22,03
bpss_z_3	-251,62	-178,68	-225,58	-165,92	-166,84	-152,65	-97,88	-139,99	-94,10	-144,68	-90,00	-71,97	-71,95	-67,96	-22,03
bpss_z_4	-251,27	-179,32	-225,27	-165,85	-166,13	-153,30	-97,82	-139,97	-94,25	-143,99	-89,98	-71,93	-72,10	-67,97	-22,02

Fortsetzung Tabelle C60

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
bpsr_e_1	-16,25	-12,17	-12,49	-3,70	-4,13	-8,39	-3,70	-0,02	-0,07	-4,09	0,02	-7,88	-8,47	-4,08	-3,76
bpsr_e_2	-17,37	-11,93	-13,58	-3,71	-5,35	-8,16	-3,68	-0,01	-0,07	-5,27	-0,02	-9,19	-8,41	-5,44	-3,79
bpsr_e_3	-16,92	-12,09	-13,13	-3,79	-4,67	-8,31	-3,69	-0,08	-0,07	-4,59	-0,02	-8,60	-8,65	-4,84	-3,80
bpsr_e_4	-16,40	-12,12	-12,63	-3,64	-4,38	-8,33	-3,70	0,04	-0,06	-4,33	0,01	-8,07	-8,37	-4,28	-3,76
bpsr_z_1	-16,43	-12,35	-12,48	-3,91	-4,15	-8,37	-3,90	-0,02	-0,07	-4,09	0,01	-8,07	-8,44	-4,09	-3,95
<b>bpsr_z_2</b>	<b>-17,52</b>	<b>-12,10</b>	<b>-13,57</b>	<b>-3,89</b>	<b>-5,34</b>	<b>-8,15</b>	<b>-3,88</b>	<b>-0,01</b>	<b>-0,08</b>	<b>-5,27</b>	<b>0,01</b>	<b>-9,39</b>	<b>-8,37</b>	<b>-5,42</b>	<b>-3,95</b>
bpsr_z_3	-17,08	-12,26	-13,12	-3,98	-4,66	-8,29	-3,89	-0,08	-0,07	-4,59	0,00	-8,79	-8,60	-4,82	-3,97
bpsr_z_4	-16,58	-12,29	-12,63	-3,84	-4,39	-8,32	-3,89	0,04	-0,07	-4,33	0,01	-8,27	-8,35	-4,28	-3,95
bpss_e_1	-17,01	-13,03	-13,27	-3,75	-3,93	-9,29	-3,67	-0,08	-0,04	-3,89	-0,01	-7,71	-9,45	-3,98	-3,74
<b>bpss_e_2</b>	<b>-18,86</b>	<b>-13,20</b>	<b>-15,11</b>	<b>-3,65</b>	<b>-5,62</b>	<b>-9,42</b>	<b>-3,69</b>	<b>0,03</b>	<b>-0,05</b>	<b>-5,59</b>	<b>0,01</b>	<b>-9,45</b>	<b>-9,58</b>	<b>-5,66</b>	<b>-3,75</b>
bpss_e_3	-17,46	-12,50	-13,73	-3,74	-4,80	-8,75	-3,67	-0,07	-0,04	-4,77	0,01	-8,72	-9,02	-4,96	-3,74
bpss_e_4	-17,03	-13,03	-13,29	-3,75	-3,98	-9,29	-3,67	-0,06	-0,04	-3,93	-0,01	-7,73	-9,44	-4,00	-3,75
bpss_z_1	-17,23	-13,26	-13,26	-3,94	-4,00	-9,28	-3,86	-0,08	-0,13	-3,89	0,01	-7,96	-9,48	-3,96	-3,97
bpss_z_2	-18,68	-12,99	-14,69	-3,85	-5,71	-9,01	-3,85	0,01	-0,12	-5,57	-0,01	-9,65	-9,26	-5,69	-3,98
bpss_z_3	-17,71	-12,73	-13,70	-3,96	-4,91	-8,73	-3,88	-0,06	-0,12	-4,77	-0,02	-8,97	-9,06	-4,98	-4,02
bpss_z_4	-17,25	-13,26	-13,28	-3,92	-4,04	-9,28	-3,87	-0,07	-0,13	-3,92	0,01	-7,98	-9,46	-3,98	-3,97

Fortsetzung Tabelle C60

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
bpsr_e_1	-11,75	-9,22	-8,04	-0,52	-1,20	-5,49	-2,07	3,11	1,31	-1,21	1,63	1,58	1,32	0,05	1,56
bpsr_e_2	-12,77	-8,90	-9,03	-0,52	-2,32	-5,19	-2,06	3,13	1,40	-2,29	1,61	1,57	1,41	0,05	1,57
bpsr_e_3	-12,38	-9,12	-8,64	-0,59	-1,71	-5,39	-2,06	3,07	1,33	-1,68	1,61	1,58	1,34	0,05	1,57
bpsr_e_4	-11,87	-9,17	-8,16	-0,45	-1,42	-5,44	-2,08	3,18	1,32	-1,42	1,64	1,57	1,33	0,05	1,58
bpsr_z_1	-11,97	-9,44	-8,07	-0,75	-1,22	-5,51	-2,30	3,08	1,30	-1,22	1,62	1,55	1,31	0,05	1,56
<b>bpsr_z_2</b>	<b>-12,97</b>	<b>-9,12</b>	<b>-9,07</b>	<b>-0,74</b>	<b>-2,31</b>	<b>-5,21</b>	<b>-2,30</b>	<b>3,08</b>	<b>1,38</b>	<b>-2,30</b>	<b>1,63</b>	<b>1,53</b>	<b>1,40</b>	<b>0,05</b>	<b>1,57</b>
bpsr_z_3	-12,58	-9,33	-8,67	-0,81	-1,70	-5,42	-2,29	3,03	1,32	-1,69	1,63	1,54	1,34	0,05	1,57
bpsr_z_4	-12,09	-9,38	-8,19	-0,68	-1,44	-5,46	-2,31	3,15	1,30	-1,43	1,64	1,53	1,33	0,05	1,58
bpss_e_1	-12,26	-9,88	-8,58	-0,45	-0,83	-6,20	-1,97	3,17	1,46	-0,84	1,65	1,64	1,44	0,05	1,60
<b>bpss_e_2</b>	<b>-13,82</b>	<b>-9,73</b>	<b>-10,12</b>	<b>-0,38</b>	<b>-2,21</b>	<b>-6,01</b>	<b>-1,99</b>	<b>3,24</b>	<b>1,78</b>	<b>-2,24</b>	<b>1,64</b>	<b>1,64</b>	<b>1,78</b>	<b>0,05</b>	<b>1,57</b>
bpss_e_3	-12,61	-9,23	-8,93	-0,50	-1,55	-5,53	-2,02	3,12	1,62	-1,57	1,64	1,60	1,62	0,05	1,58
bpss_e_4	-12,31	-9,88	-8,62	-0,48	-0,90	-6,20	-1,97	3,15	1,46	-0,90	1,61	1,64	1,45	0,05	1,57
bpss_z_1	-12,52	-10,16	-8,61	-0,67	-0,90	-6,23	-2,20	3,13	1,37	-0,85	1,67	1,61	1,44	0,06	1,60
bpss_z_2	-13,56	-9,43	-9,63	-0,66	-2,17	-5,51	-2,22	3,14	1,86	-2,09	1,60	1,58	1,93	0,05	1,56
bpss_z_3	-12,92	-9,52	-8,96	-0,76	-1,68	-5,57	-2,26	3,09	1,52	-1,60	1,62	1,57	1,59	0,05	1,58
bpss_z_4	-12,57	-10,16	-8,65	-0,69	-0,97	-6,22	-2,20	3,11	1,37	-0,91	1,64	1,61	1,44	0,06	1,57

Abbildung C61

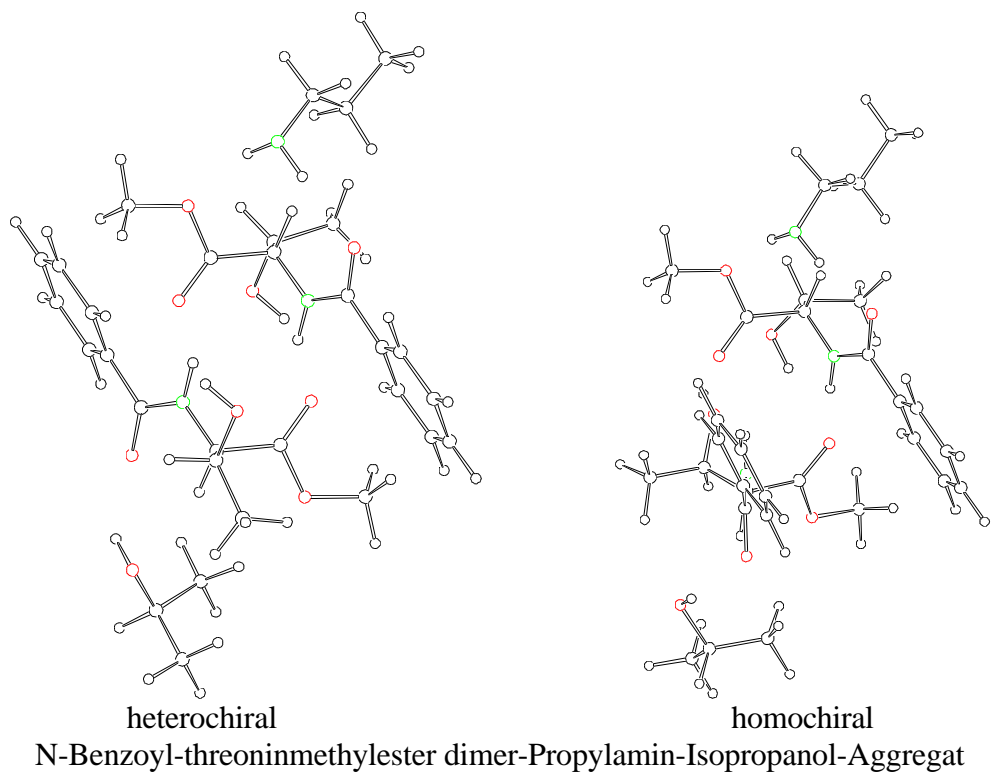


Tabelle C61 : Energien des N-Benzoyl-threoninemethylester dimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

	H / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
btsr_e_1	-413,37	-339,92	-387,82	-242,90	-245,35	-314,39	-175,00	-217,45	-171,92	-223,23	-89,99	-149,57	-149,83	-67,95	-22,02
btsr_e_2	-411,40	-339,97	-385,89	-243,17	-243,18	-314,44	-174,95	-217,75	-172,07	-221,10	-90,02	-149,53	-149,97	-68,01	-22,02
btsr_e_3	-411,30	-339,97	-385,78	-243,22	-243,01	-314,44	-174,95	-217,79	-172,08	-220,93	-90,02	-149,52	-149,98	-68,00	-22,02
btsr_e_4	-412,73	-339,92	-387,17	-243,00	-244,72	-314,40	-175,00	-217,54	-171,98	-222,59	-90,08	-149,58	-149,88	-68,03	-22,02
btsr_z_1	-412,21	-340,26	-386,50	-243,31	-244,05	-314,53	-175,36	-217,72	-172,09	-221,89	-89,99	-149,76	-149,93	-67,96	-22,03
<b>btsr_z_2</b>	<b>-413,65</b>	<b>-340,22</b>	<b>-387,90</b>	<b>-243,25</b>	<b>-245,40</b>	<b>-314,47</b>	<b>-175,36</b>	<b>-217,63</b>	<b>-172,00</b>	<b>-223,24</b>	<b>-89,97</b>	<b>-149,75</b>	<b>-149,83</b>	<b>-67,95</b>	<b>-22,03</b>
btsr_z_3	-413,02	-340,21	-387,26	-243,48	-244,70	-314,46	-175,36	-217,84	-172,10	-222,53	-90,01	-149,75	-149,94	-67,98	-22,03
btsr_z_4	-412,16	-340,26	-386,43	-243,36	-243,92	-314,53	-175,34	-217,75	-172,10	-221,76	-90,00	-149,74	-149,94	-67,96	-22,03
btss_e_1	-410,53	-338,60	-385,08	-242,08	-243,23	-313,13	-174,12	-216,70	-171,28	-221,17	-90,00	-148,74	-149,22	-67,96	-22,03
btss_e_2	-411,72	-338,53	-386,26	-241,70	-244,69	-313,07	-173,96	-216,34	-171,37	-222,63	-89,97	-148,59	-149,30	-67,94	-22,03
btss_e_3	-411,07	-338,52	-385,60	-241,88	-244,02	-313,04	-173,91	-216,51	-171,53	-221,95	-89,99	-148,55	-149,45	-67,96	-22,03
btss_e_4	-410,60	-338,60	-385,14	-242,29	-243,06	-313,15	-174,11	-216,91	-171,25	-221,00	-90,01	-148,75	-149,19	-67,97	-22,03
btss_z_1	-410,92	-339,00	-385,21	-242,29	-243,34	-313,27	-174,34	-216,81	-171,42	-221,10	-89,96	-148,85	-149,15	-67,96	-22,02
<b>btss_z_2</b>	<b>-412,14</b>	<b>-338,93</b>	<b>-386,40</b>	<b>-241,89</b>	<b>-244,89</b>	<b>-313,20</b>	<b>-174,14</b>	<b>-216,41</b>	<b>-171,54</b>	<b>-222,61</b>	<b>-89,96</b>	<b>-148,67</b>	<b>-149,27</b>	<b>-67,94</b>	<b>-22,02</b>
btss_z_3	-411,50	-338,92	-385,74	-242,09	-244,22	-313,19	-174,10	-216,59	-171,70	-221,93	-90,00	-148,62	-149,42	-67,96	-22,02
btss_z_4	-411,00	-339,00	-385,27	-242,51	-243,20	-313,28	-174,32	-217,01	-171,40	-220,93	-89,99	-148,84	-149,14	-67,97	-22,01

Fortsetzung Tabelle C61

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
btsr_e_1	-24,01	-18,50	-20,47	-3,36	-5,56	-14,99	-3,41	0,07	-0,08	-5,45	-0,02	-8,99	-15,14	-5,50	-3,54
btsr_e_2	-21,87	-18,45	-18,38	-3,61	-3,17	-14,94	-3,41	-0,21	-0,08	-3,11	0,01	-6,94	-15,35	-3,42	-3,49
btsr_e_3	-21,77	-18,45	-18,27	-3,68	-3,01	-14,94	-3,41	-0,27	-0,08	-2,94	0,00	-6,84	-15,42	-3,33	-3,50
btsr_e_4	-23,23	-18,45	-19,68	-3,38	-4,79	-14,94	-3,41	0,06	-0,08	-4,68	-0,03	-8,25	-15,14	-4,78	-3,54
btsr_z_1	-22,53	-18,54	-18,84	-3,56	-4,12	-14,84	-3,57	0,01	-0,13	-4,00	0,00	-7,69	-14,96	-3,99	-3,68
<b>btsr_z_2</b>	<b>-24,09</b>	<b>-18,61</b>	<b>-20,37</b>	<b>-3,52</b>	<b>-5,59</b>	<b>-14,89</b>	<b>-3,59</b>	<b>0,07</b>	<b>-0,14</b>	<b>-5,46</b>	<b>0,00</b>	<b>-9,21</b>	<b>-15,05</b>	<b>-5,49</b>	<b>-3,73</b>
btsr_z_3	-23,33	-18,50	-19,60	-3,72	-4,77	-14,77	-3,59	-0,12	-0,14	-4,62	-0,01	-8,55	-15,13	-4,84	-3,74
btsr_z_4	-22,49	-18,56	-18,79	-3,63	-3,99	-14,85	-3,58	-0,05	-0,13	-3,86	-0,01	-7,63	-15,06	-3,93	-3,70
btss_e_1	-22,58	-18,60	-19,15	-3,34	-4,01	-15,17	-3,34	0,00	-0,03	-3,98	-0,01	-7,40	-15,25	-3,97	-3,43
btss_e_2	-23,85	-18,60	-20,43	-3,14	-5,42	-15,17	-3,33	0,19	-0,03	-5,40	0,00	-8,68	-15,13	-5,25	-3,42
btss_e_3	-23,08	-18,49	-19,64	-3,34	-4,58	-15,04	-3,33	0,00	-0,04	-4,54	0,00	-8,04	-15,21	-4,59	-3,44
btss_e_4	-22,66	-18,62	-19,22	-3,54	-3,87	-15,20	-3,32	-0,19	-0,03	-3,83	-0,01	-7,45	-15,50	-4,04	-3,44
btss_z_1	-22,94	-18,98	-19,25	-3,45	-4,21	-15,27	-3,48	0,00	-0,25	-3,98	0,02	-7,69	-15,48	-3,96	-3,69
<b>btss_z_2</b>	<b>-24,25</b>	<b>-18,98</b>	<b>-20,53</b>	<b>-3,27</b>	<b>-5,67</b>	<b>-15,27</b>	<b>-3,46</b>	<b>0,19</b>	<b>-0,26</b>	<b>-5,40</b>	<b>0,00</b>	<b>-8,98</b>	<b>-15,39</b>	<b>-5,27</b>	<b>-3,72</b>
btss_z_3	-23,48	-18,86	-19,74	-3,49	-4,82	-15,14	-3,46	-0,01	-0,26	-4,54	-0,02	-8,31	-15,47	-4,62	-3,74
btss_z_4	-23,04	-19,01	-19,32	-3,68	-4,08	-15,30	-3,46	-0,19	-0,25	-3,82	-0,01	-7,73	-15,75	-4,03	-3,72

Fortsetzung Tabelle C61

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
btsr_e_1	-16,37	-12,46	-12,90	1,41	-1,04	-9,01	-0,23	4,78	2,85	-1,00	1,63	3,12	2,86	0,06	1,59
btsr_e_2	-14,40	-12,51	-10,97	1,14	1,13	-9,06	-0,18	4,48	2,70	1,13	1,60	3,16	2,72	0,06	1,53
btsr_e_3	-14,30	-12,51	-10,86	1,09	1,30	-9,06	-0,18	4,44	2,69	1,30	1,60	3,17	2,71	0,06	1,54
btsr_e_4	-15,73	-12,46	-12,25	1,31	-0,41	-9,02	-0,23	4,69	2,79	-0,36	1,54	3,11	2,81	0,06	1,51
btsr_z_1	-15,21	-12,80	-11,58	1,00	0,26	-9,15	-0,59	4,51	2,68	0,34	1,63	2,93	2,76	0,05	1,58
<b>btsr_z_2</b>	<b>-16,65</b>	<b>-12,76</b>	<b>-12,98</b>	<b>1,06</b>	<b>-1,09</b>	<b>-9,09</b>	<b>-0,59</b>	<b>4,60</b>	<b>2,77</b>	<b>-1,01</b>	<b>1,65</b>	<b>2,94</b>	<b>2,86</b>	<b>0,05</b>	<b>1,59</b>
btsr_z_3	-16,02	-12,75	-12,34	0,83	-0,39	-9,08	-0,59	4,39	2,67	-0,30	1,61	2,94	2,75	0,05	1,56
btsr_z_4	-15,16	-12,80	-11,51	0,95	0,39	-9,15	-0,57	4,48	2,67	0,47	1,62	2,95	2,75	0,05	1,58
btss_e_1	-13,53	-11,14	-10,16	2,23	1,08	-7,75	0,65	5,53	3,49	1,06	1,62	3,95	3,47	0,05	1,58
btss_e_2	-14,72	-11,07	-11,34	2,61	-0,38	-7,69	0,81	5,89	3,40	-0,40	1,65	4,10	3,39	0,05	1,60
btss_e_3	-14,07	-11,06	-10,68	2,43	0,29	-7,66	0,86	5,72	3,24	0,28	1,63	4,14	3,24	0,05	1,58
btss_e_4	-13,60	-11,14	-10,22	2,02	1,25	-7,77	0,66	5,32	3,52	1,23	1,61	3,94	3,50	0,05	1,57
btss_z_1	-13,92	-11,54	-10,29	2,02	0,97	-7,89	0,43	5,42	3,35	1,13	1,66	3,84	3,54	0,06	1,58
<b>btss_z_2</b>	<b>-15,14</b>	<b>-11,47</b>	<b>-11,48</b>	<b>2,42</b>	<b>-0,58</b>	<b>-7,82</b>	<b>0,63</b>	<b>5,82</b>	<b>3,23</b>	<b>-0,38</b>	<b>1,66</b>	<b>4,02</b>	<b>3,42</b>	<b>0,06</b>	<b>1,60</b>
btss_z_3	-14,50	-11,46	-10,82	2,22	0,09	-7,81	0,67	5,64	3,07	0,30	1,62	4,07	3,27	0,06	1,58
btss_z_4	-14,00	-11,54	-10,35	1,80	1,11	-7,90	0,45	5,22	3,37	1,30	1,63	3,85	3,55	0,07	1,57

Abbildung C62

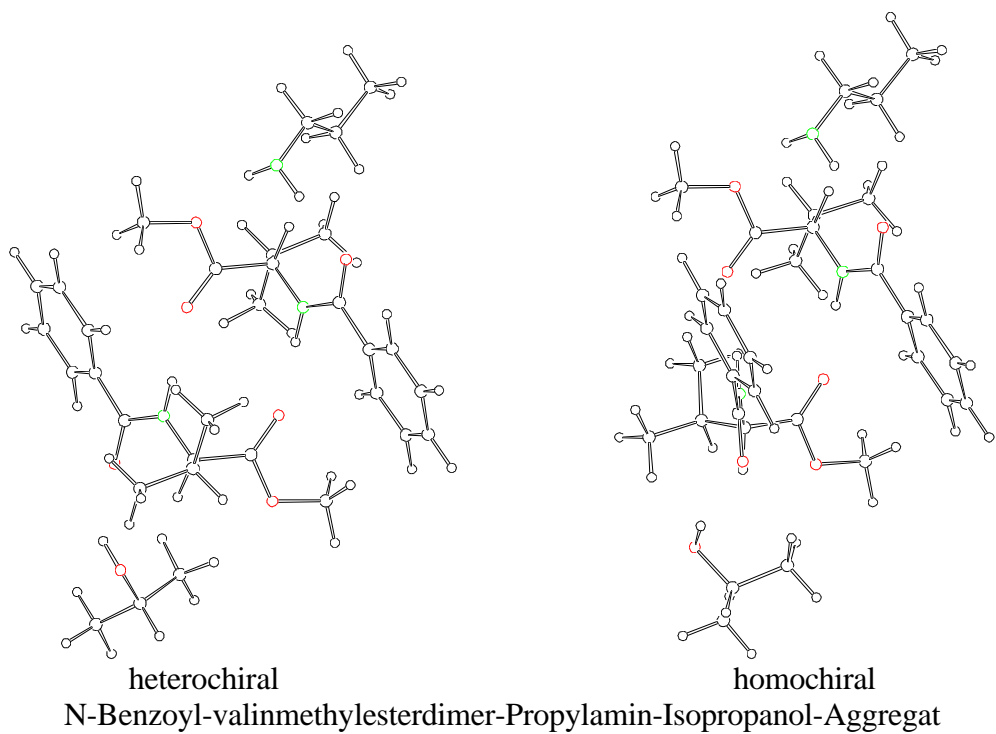


Tabelle C62 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
bvsr_e_1	-327,15	-255,16	-301,59	-204,26	-204,98	-229,58	-136,31	-178,73	-133,00	-182,96	-89,97	-110,77	-110,97	-67,96	-22,02
bvsr_e_2	-328,20	-255,13	-302,59	-204,22	-206,08	-229,54	-136,32	-178,65	-132,99	-184,03	-90,01	-110,76	-110,95	-67,97	-22,02
bvsr_e_3	-327,63	-255,13	-302,01	-204,36	-205,43	-229,53	-136,31	-178,78	-133,03	-183,37	-90,02	-110,75	-111,00	-67,98	-22,02
bvsr_e_4	-326,58	-255,15	-301,02	-204,32	-204,35	-229,56	-136,32	-178,79	-132,98	-182,33	-90,02	-110,76	-110,95	-68,01	-22,02
bvsr_z_1	-327,55	-255,58	-301,67	-204,62	-205,07	-229,68	-136,64	-178,82	-133,12	-182,95	-89,99	-110,83	-110,99	-67,97	-22,03
bvsr_z_2	-327,16	-255,54	-301,24	-204,81	-204,48	-229,62	-136,63	-178,97	-133,13	-182,35	-90,03	-110,80	-111,00	-67,99	-22,03
<b>bvsr_z_3</b>	<b>-330,00</b>	<b>-255,55</b>	<b>-304,08</b>	<b>-206,04</b>	<b>-207,53</b>	<b>-229,63</b>	<b>-136,65</b>	<b>-180,22</b>	<b>-133,08</b>	<b>-185,42</b>	<b>-91,49</b>	<b>-110,83</b>	<b>-110,95</b>	<b>-69,47</b>	<b>-22,03</b>
bvsr_z_4	-327,61	-255,58	-301,72	-204,62	-205,16	-229,67	-136,64	-178,82	-133,15	-183,04	-89,99	-110,83	-111,02	-67,96	-22,03
bvss_e_1	-327,10	-255,18	-301,43	-204,00	-204,83	-229,50	-136,10	-178,51	-132,88	-182,72	-89,97	-110,59	-110,76	-67,97	-22,00
bvss_e_2	-328,17	-255,14	-302,54	-203,96	-205,95	-229,48	-136,07	-178,49	-132,95	-183,86	-89,95	-110,59	-110,83	-67,96	-22,00
bvss_e_3	-327,62	-255,15	-301,93	-204,09	-205,31	-229,45	-136,05	-178,60	-133,00	-183,19	-89,97	-110,56	-110,86	-67,98	-22,00
bvss_e_4	-326,61	-255,19	-300,95	-204,13	-204,22	-229,50	-136,12	-178,65	-132,88	-182,13	-90,00	-110,62	-110,76	-68,01	-22,00
bvss_z_1	-327,55	-255,64	-301,59	-204,40	-204,93	-229,64	-136,51	-178,66	-132,99	-182,71	-89,96	-110,73	-110,74	-67,97	-22,03
<b>bvss_z_2</b>	<b>-328,68</b>	<b>-255,60</b>	<b>-302,70</b>	<b>-204,39</b>	<b>-206,11</b>	<b>-229,62</b>	<b>-136,48</b>	<b>-178,63</b>	<b>-133,06</b>	<b>-183,85</b>	<b>-89,99</b>	<b>-110,73</b>	<b>-110,81</b>	<b>-67,96</b>	<b>-22,03</b>
bvss_z_3	-328,10	-255,60	-302,09	-204,54	-205,48	-229,62	-136,48	-178,77	-133,13	-183,20	-90,02	-110,72	-110,87	-67,98	-22,03
bvss_z_4	-327,06	-255,64	-301,09	-204,54	-204,35	-229,63	-136,54	-178,79	-132,99	-182,11	-90,01	-110,76	-110,74	-68,01	-22,03

Fortsetzung Tabelle C62

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
bvsr_e_1	-15,43	-11,41	-11,90	-3,50	-4,03	-7,85	-3,52	0,00	-0,01	-4,04	0,01	-7,59	-7,87	-4,02	-3,53
bvsr_e_2	-16,50	-11,40	-12,91	-3,47	-5,13	-7,83	-3,54	0,08	-0,01	-5,10	-0,02	-8,66	-7,86	-5,10	-3,59
bvsr_e_3	-15,88	-11,36	-12,28	-3,60	-4,43	-7,78	-3,54	-0,04	-0,01	-4,39	-0,02	-8,08	-7,95	-4,52	-3,60
bvsr_e_4	-14,84	-11,42	-11,30	-3,53	-3,38	-7,85	-3,53	-0,02	-0,02	-3,38	0,01	-7,00	-7,93	-3,42	-3,54
bvsr_z_1	-15,72	-11,73	-11,87	-3,78	-4,07	-7,85	-3,78	-0,02	-0,10	-3,99	0,01	-7,88	-7,95	-4,00	-3,85
bvsr_z_2	-15,34	-11,71	-11,44	-3,99	-3,45	-7,82	-3,80	-0,18	-0,10	-3,35	-0,01	-7,51	-8,19	-3,63	-3,90
<b>bvsr_z_3</b>	<b>-16,72</b>	<b>-11,74</b>	<b>-12,83</b>	<b>-3,72</b>	<b>-5,09</b>	<b>-7,85</b>	<b>-3,80</b>	<b>0,08</b>	<b>-0,10</b>	<b>-4,99</b>	<b>0,01</b>	<b>-8,88</b>	<b>-7,93</b>	<b>-4,98</b>	<b>-3,89</b>
bvsr_z_4	-15,77	-11,69	-11,91	-3,80	-4,15	-7,81	-3,78	-0,03	-0,10	-4,06	0,00	-7,96	-7,93	-4,08	-3,86
bvss_e_1	-15,77	-11,82	-12,11	-3,44	-4,10	-8,14	-3,50	0,05	-0,11	-3,99	0,00	-7,63	-8,28	-3,95	-3,66
bvss_e_2	-16,79	-11,72	-13,16	-3,40	-5,15	-8,06	-3,48	0,06	-0,11	-5,07	0,01	-8,74	-8,24	-5,07	-3,63
bvss_e_3	-16,22	-11,73	-12,54	-3,55	-4,48	-8,03	-3,49	-0,07	-0,14	-4,36	0,01	-8,20	-8,38	-4,50	-3,68
bvss_e_4	-15,21	-11,81	-11,56	-3,50	-3,45	-8,12	-3,50	-0,02	-0,12	-3,36	0,01	-7,11	-8,35	-3,41	-3,65
bvss_z_1	-16,08	-12,13	-12,15	-3,67	-4,19	-8,16	-3,75	0,04	-0,22	-4,00	0,03	-7,95	-8,33	-3,95	-3,93
<b>bvss_z_2</b>	<b>-17,15</b>	<b>-12,04</b>	<b>-13,20</b>	<b>-3,67</b>	<b>-5,31</b>	<b>-8,09</b>	<b>-3,73</b>	<b>0,06</b>	<b>-0,23</b>	<b>-5,08</b>	<b>0,00</b>	<b>-9,06</b>	<b>-8,34</b>	<b>-5,11</b>	<b>-3,95</b>
bvss_z_3	-16,50	-11,98	-12,52	-3,81	-4,60	-8,02	-3,73	-0,07	-0,23	-4,35	-0,02	-8,46	-8,42	-4,52	-3,98
bvss_z_4	-15,53	-12,12	-11,58	-3,74	-3,57	-8,13	-3,76	-0,02	-0,23	-3,37	0,03	-7,42	-8,41	-3,42	-3,95

Fortsetzung Tabelle C62

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
bvsr_e_1	-12,19	-9,74	-8,71	-0,97	-1,69	-6,24	-2,56	2,48	0,75	-1,75	1,65	0,90	0,70	0,06	1,58
bvsr_e_2	-13,24	-9,71	-9,71	-0,93	-2,79	-6,20	-2,57	2,56	0,76	-2,82	1,61	0,91	0,72	0,06	1,57
bvsr_e_3	-12,67	-9,71	-9,13	-1,07	-2,14	-6,19	-2,56	2,43	0,72	-2,16	1,60	0,92	0,67	0,06	1,56
bvsr_e_4	-11,62	-9,73	-8,14	-1,03	-1,06	-6,22	-2,57	2,42	0,77	-1,12	1,60	0,91	0,72	0,06	1,53
bvsr_z_1	-12,59	-10,16	-8,79	-1,33	-1,78	-6,34	-2,89	2,39	0,63	-1,74	1,63	0,84	0,68	0,05	1,57
bvsr_z_2	-12,20	-10,12	-8,36	-1,52	-1,19	-6,28	-2,88	2,24	0,62	-1,14	1,59	0,87	0,67	0,05	1,55
<b>bvsr_z_3</b>	<b>-15,04</b>	<b>-10,13</b>	<b>-11,20</b>	<b>-2,75</b>	<b>-4,24</b>	<b>-6,29</b>	<b>-2,90</b>	<b>0,99</b>	<b>0,67</b>	<b>-4,21</b>	<b>0,13</b>	<b>0,84</b>	<b>0,72</b>	<b>0,05</b>	<b>0,07</b>
bvsr_z_4	-12,65	-10,16	-8,84	-1,33	-1,87	-6,33	-2,89	2,39	0,60	-1,83	1,63	0,84	0,65	0,05	1,58
bvss_e_1	-12,14	-9,76	-8,55	-0,71	-1,54	-6,16	-2,35	2,70	0,87	-1,51	1,65	1,08	0,91	0,08	1,57
bvss_e_2	-13,21	-9,72	-9,66	-0,67	-2,66	-6,14	-2,32	2,72	0,80	-2,65	1,67	1,08	0,84	0,08	1,58
bvss_e_3	-12,66	-9,73	-9,05	-0,80	-2,02	-6,11	-2,30	2,61	0,75	-1,98	1,65	1,11	0,81	0,08	1,56
bvss_e_4	-11,65	-9,77	-8,07	-0,84	-0,93	-6,16	-2,37	2,56	0,87	-0,92	1,62	1,05	0,91	0,08	1,53
bvss_z_1	-12,59	-10,22	-8,71	-1,11	-1,64	-6,30	-2,76	2,55	0,76	-1,50	1,66	0,94	0,93	0,05	1,57
<b>bvss_z_2</b>	<b>-13,72</b>	<b>-10,18</b>	<b>-9,82</b>	<b>-1,10</b>	<b>-2,82</b>	<b>-6,28</b>	<b>-2,73</b>	<b>2,58</b>	<b>0,69</b>	<b>-2,64</b>	<b>1,63</b>	<b>0,94</b>	<b>0,86</b>	<b>0,05</b>	<b>1,58</b>
bvss_z_3	-13,14	-10,18	-9,21	-1,25	-2,19	-6,28	-2,73	2,44	0,62	-1,99	1,60	0,95	0,80	0,05	1,56
bvss_z_4	-12,10	-10,22	-8,21	-1,25	-1,06	-6,29	-2,79	2,42	0,76	-0,90	1,61	0,91	0,93	0,05	1,53



Abbildung C63

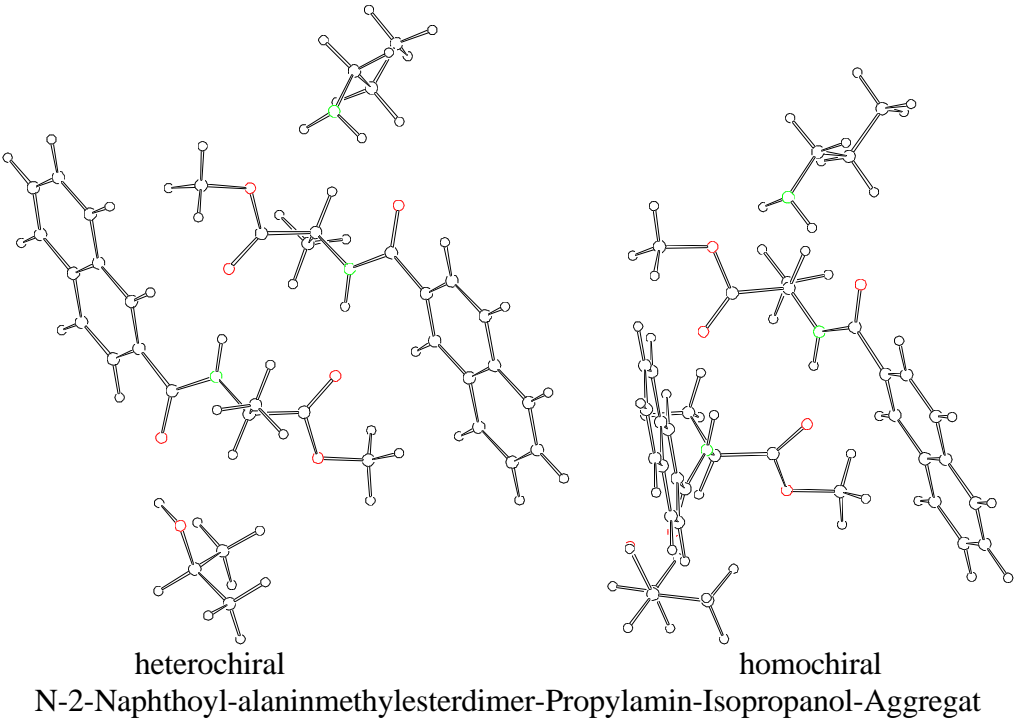


Tabelle C63 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylesterdimer-Propylamin-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	AL	PA
cnsr_e_1	-268,63	-196,66	-242,76	-174,54	-174,99	-170,75	-106,57	-148,66	-103,04	-153,00	-89,96	-80,68	-81,02	-67,96	-22,01
cnsr_e_2	-269,16	-196,63	-243,24	-174,44	-175,50	-170,74	-106,54	-148,53	-102,98	-153,47	-90,01	-80,66	-80,97	-67,97	-22,01
cnsr_e_3	-268,50	-196,62	-242,59	-174,56	-174,65	-170,73	-106,53	-148,66	-102,94	-152,62	-89,97	-80,65	-80,93	-67,94	-22,01
cnsr_e_4	-268,64	-196,65	-242,75	-174,61	-174,91	-170,74	-106,56	-148,73	-103,03	-152,91	-89,97	-80,66	-81,02	-67,97	-22,01
cnsr_z_1	-268,92	-196,92	-242,85	-174,81	-174,99	-170,85	-106,74	-148,82	-103,10	-152,89	-89,98	-80,76	-81,00	-67,97	-22,01
cnsr_z_2	-268,58	-196,80	-242,53	-174,80	-174,75	-170,75	-106,77	-148,83	-103,08	-152,65	-89,96	-80,81	-80,99	-67,95	-22,01
<b>cnsr_z_3</b>	<b>-269,42</b>	<b>-196,90</b>	<b>-243,35</b>	<b>-174,61</b>	<b>-175,55</b>	<b>-170,84</b>	<b>-106,72</b>	<b>-148,63</b>	<b>-103,05</b>	<b>-153,46</b>	<b>-89,98</b>	<b>-80,75</b>	<b>-80,96</b>	<b>-67,97</b>	<b>-22,01</b>
cnsr_z_4	-268,91	-196,92	-242,86	-174,72	-175,07	-170,86	-106,75	-148,75	-103,10	-152,98	-89,97	-80,77	-81,01	-67,96	-22,01
cnss_e_1	-268,82	-196,93	-243,14	-174,47	-175,21	-171,22	-106,54	-148,92	-103,31	-153,12	-89,98	-80,97	-81,20	-67,97	-22,02
cnss_e_2	-269,44	-196,90	-243,76	-174,43	-175,72	-171,21	-106,50	-148,86	-103,28	-153,63	-89,97	-80,94	-81,17	-67,95	-22,02
cnss_e_3	-268,71	-196,89	-243,00	-174,63	-174,91	-171,18	-106,49	-149,05	-103,37	-152,80	-89,99	-80,92	-81,26	-67,97	-22,02
cnss_e_4	-268,80	-196,93	-243,13	-174,50	-175,21	-171,23	-106,54	-148,94	-103,34	-153,12	-90,00	-80,96	-81,24	-67,99	-22,02
cnss_z_1	-269,18	-197,30	-243,37	-174,80	-175,32	-171,46	-106,88	-149,15	-103,43	-153,17	-89,96	-81,21	-81,25	-67,97	-22,02
<b>cnss_z_2</b>	<b>-269,83</b>	<b>-197,27</b>	<b>-243,99</b>	<b>-174,78</b>	<b>-175,88</b>	<b>-171,45</b>	<b>-106,85</b>	<b>-149,11</b>	<b>-103,41</b>	<b>-153,69</b>	<b>-89,98</b>	<b>-81,19</b>	<b>-81,24</b>	<b>-67,95</b>	<b>-22,02</b>
cnss_z_3	-269,10	-197,26	-243,25	-174,99	-175,06	-171,44	-106,84	-149,31	-103,50	-152,85	-90,00	-81,18	-81,32	-67,97	-22,02
cnss_z_4	-269,18	-197,30	-243,35	-174,87	-175,32	-171,46	-106,86	-149,19	-103,49	-153,15	-89,99	-81,18	-81,31	-67,97	-22,02

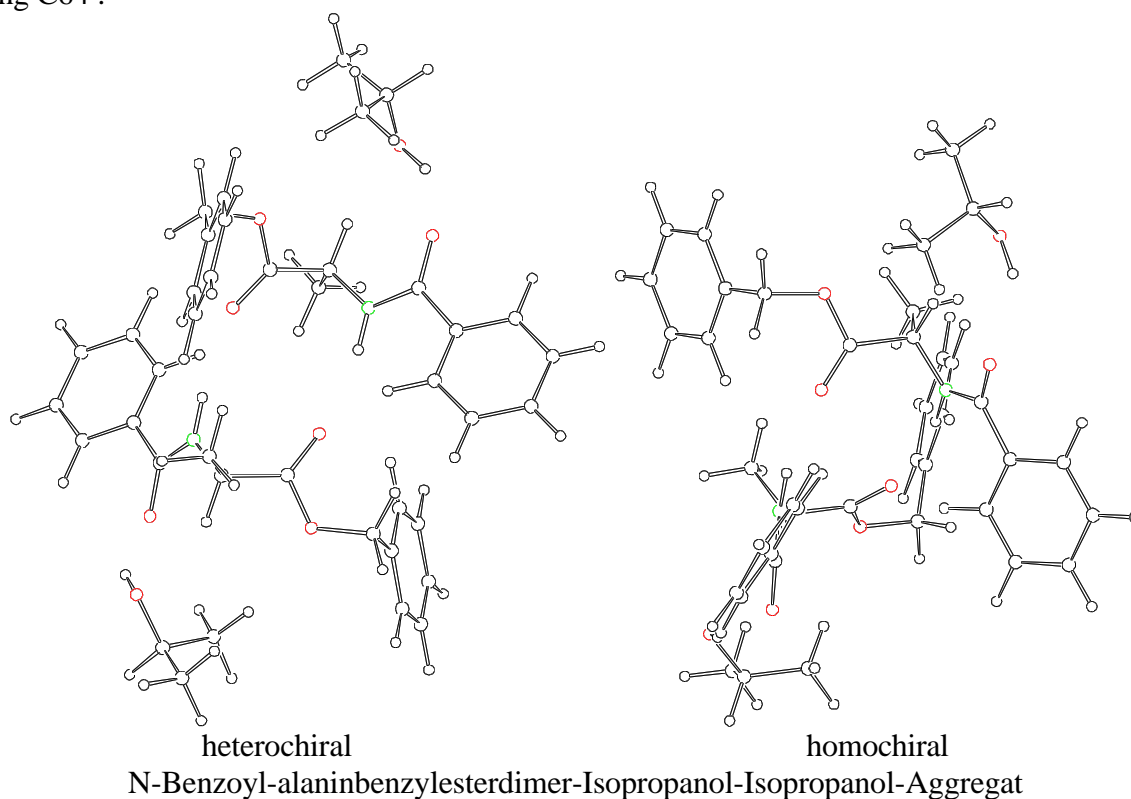
Fortsetzung Tabelle C63

	$W_A$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1 AS2 - PA AL	AS1 PA - AS2 AL	AS1 AS2 PA - AL	AS1 AS2 AL - PA
cnr_e_1	-16,96	-12,95	-13,10	-3,89	-4,00	-9,05	-3,89	-0,02	0,00	-4,01	0,01	-7,93	-9,06	-4,02	-3,87
cnr_e_2	-17,55	-13,00	-13,64	-3,80	-4,55	-9,11	-3,88	0,10	0,00	-4,53	-0,02	-8,41	-9,15	-4,55	-3,91
cnr_e_3	-16,97	-13,03	-13,07	-3,96	-3,77	-9,15	-3,87	-0,07	0,00	-3,75	-0,02	-7,80	-9,35	-3,94	-3,90
cnr_e_4	-16,98	-12,96	-13,10	-3,97	-3,91	-9,06	-3,89	-0,10	0,00	-3,92	0,01	-7,93	-9,17	-4,02	-3,88
cnr_z_1	-17,19	-13,15	-13,13	-4,07	-4,02	-9,09	-3,98	-0,09	-0,09	-3,92	-0,01	-8,09	-9,28	-4,03	-4,06
cnr_z_2	-16,83	-13,00	-12,79	-4,04	-3,80	-8,95	-3,96	-0,08	-0,09	-3,72	-0,01	-7,86	-9,15	-3,83	-4,04
<b>cnr_z_3</b>	<b>-17,73</b>	<b>-13,19</b>	<b>-13,68</b>	<b>-3,88</b>	<b>-4,61</b>	<b>-9,14</b>	<b>-3,97</b>	<b>0,09</b>	<b>-0,09</b>	<b>-4,53</b>	<b>0,00</b>	<b>-8,60</b>	<b>-9,24</b>	<b>-4,54</b>	<b>-4,06</b>
cnr_z_4	-17,17	-13,14	-13,12	-3,98	-4,09	-9,08	-3,97	-0,02	-0,09	-4,01	0,00	-8,09	-9,18	-4,02	-4,04
cnss_e_1	-16,67	-12,75	-13,01	-3,52	-4,03	-9,06	-3,55	0,02	-0,09	-3,95	0,00	-7,62	-9,17	-3,92	-3,67
cnss_e_2	-17,36	-12,77	-13,69	-3,52	-4,57	-9,10	-3,55	0,03	-0,08	-4,50	0,00	-8,26	-9,31	-4,59	-3,66
cnss_e_3	-16,55	-12,70	-12,86	-3,72	-3,66	-9,01	-3,55	-0,16	-0,10	-3,57	0,00	-7,55	-9,42	-3,85	-3,69
cnss_e_4	-16,60	-12,71	-12,94	-3,53	-3,97	-9,03	-3,55	0,00	-0,09	-3,89	0,01	-7,57	-9,15	-3,88	-3,66
cnss_z_1	-16,73	-12,83	-12,95	-3,60	-4,09	-9,00	-3,65	0,02	-0,17	-3,95	0,02	-7,75	-9,13	-3,91	-3,79
<b>cnss_z_2</b>	<b>-17,43</b>	<b>-12,83</b>	<b>-13,61</b>	<b>-3,62</b>	<b>-4,68</b>	<b>-9,02</b>	<b>-3,65</b>	<b>0,03</b>	<b>-0,16</b>	<b>-4,50</b>	<b>-0,01</b>	<b>-8,40</b>	<b>-9,28</b>	<b>-4,60</b>	<b>-3,82</b>
cnss_z_3	-16,61	-12,75	-12,78	-3,82	-3,76	-8,94	-3,64	-0,16	-0,17	-3,56	-0,02	-7,66	-9,41	-3,87	-3,83
cnss_z_4	-16,70	-12,79	-12,88	-3,69	-4,02	-8,96	-3,66	-0,03	-0,16	-3,87	0,00	-7,74	-9,17	-3,91	-3,82

Fortsetzung Tabelle C63

	$W_M$ / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 PA	AS1 AS2 AL	AS1 PA AL	AS2 PA AL	AS1 AS2	AS1 PA	AS1 AL	AS2 PA	AS2 AL	PA AL	AS1	AS2	PA	AL
cnr_e_1	-12,41	-9,98	-8,62	-0,62	-1,07	-6,15	-2,19	3,18	1,34	-1,16	1,66	1,63	1,28	0,07	1,58
cnr_e_2	-12,94	-9,95	-9,10	-0,52	-1,58	-6,14	-2,16	3,31	1,40	-1,63	1,61	1,64	1,33	0,07	1,57
cnr_e_3	-12,28	-9,94	-8,45	-0,64	-0,73	-6,13	-2,15	3,18	1,44	-0,78	1,65	1,65	1,37	0,07	1,60
cnr_e_4	-12,42	-9,97	-8,61	-0,69	-0,99	-6,14	-2,18	3,11	1,35	-1,07	1,65	1,64	1,28	0,07	1,57
cnr_z_1	-12,70	-10,24	-8,71	-0,89	-1,07	-6,25	-2,36	3,02	1,28	-1,05	1,64	1,54	1,30	0,07	1,57
cnr_z_2	-12,36	-10,12	-8,39	-0,88	-0,83	-6,15	-2,39	3,01	1,30	-0,81	1,66	1,49	1,31	0,07	1,59
<b>cnr_z_3</b>	<b>-13,20</b>	<b>-10,22</b>	<b>-9,21</b>	<b>-0,69</b>	<b>-1,63</b>	<b>-6,24</b>	<b>-2,34</b>	<b>3,21</b>	<b>1,33</b>	<b>-1,62</b>	<b>1,64</b>	<b>1,55</b>	<b>1,34</b>	<b>0,07</b>	<b>1,57</b>
cnr_z_4	-12,69	-10,24	-8,72	-0,80	-1,15	-6,26	-2,37	3,09	1,28	-1,14	1,65	1,53	1,29	0,07	1,58
cnss_e_1	-12,60	-10,25	-9,00	-0,55	-1,29	-6,62	-2,16	2,92	1,07	-1,28	1,64	1,33	1,10	0,06	1,57
cnss_e_2	-13,22	-10,22	-9,62	-0,51	-1,80	-6,61	-2,12	2,98	1,10	-1,79	1,65	1,36	1,13	0,06	1,59
cnss_e_3	-12,49	-10,21	-8,86	-0,71	-0,99	-6,58	-2,11	2,79	1,01	-0,96	1,63	1,38	1,04	0,06	1,57
cnss_e_4	-12,58	-10,25	-8,99	-0,58	-1,29	-6,63	-2,16	2,90	1,04	-1,28	1,62	1,34	1,06	0,06	1,55
cnss_z_1	-12,96	-10,62	-9,23	-0,88	-1,40	-6,86	-2,50	2,69	0,95	-1,33	1,66	1,09	1,05	0,06	1,57
<b>cnss_z_2</b>	<b>-13,61</b>	<b>-10,59</b>	<b>-9,85</b>	<b>-0,86</b>	<b>-1,96</b>	<b>-6,85</b>	<b>-2,47</b>	<b>2,73</b>	<b>0,97</b>	<b>-1,85</b>	<b>1,64</b>	<b>1,11</b>	<b>1,06</b>	<b>0,06</b>	<b>1,59</b>
cnss_z_3	-12,88	-10,58	-9,11	-1,07	-1,14	-6,84	-2,46	2,53	0,88	-1,01	1,62	1,12	0,98	0,06	1,57
cnss_z_4	-12,96	-10,62	-9,21	-0,95	-1,40	-6,86	-2,48	2,65	0,89	-1,31	1,63	1,12	0,99	0,06	1,57

Abbildung C64 :



Tabelle\* C : Energien des N-Benzoyl-alaninbenzylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bbsr_1_1	-294,32	-222,29	-222,26	-211,45	-211,93	-150,22	-143,50	-139,39	-139,90	-143,98	-135,93	-71,45	-71,94	-67,97	-67,96
bbsr_1_2	-294,23	-222,21	-222,19	-210,93	-211,95	-150,16	-143,01	-139,10	-139,91	-143,87	-135,91	-71,17	-71,83	-67,97	-67,95
bbsr_1_3	-294,87	-222,84	-222,24	-211,82	-212,02	-150,20	-143,88	-139,33	-139,98	-143,96	-135,96	-71,39	-71,93	-67,97	-67,98
bbsr_1_4	-294,30	-222,26	-222,27	-211,40	-211,94	-150,23	-143,45	-139,38	-139,90	-143,98	-135,95	-71,43	-71,95	-67,97	-67,97
bbsr_2_1	-294,83	-222,84	-222,21	-211,84	-211,92	-150,20	-143,88	-139,36	-139,97	-143,88	-135,93	-71,38	-71,91	-67,96	-67,98
bbsr_2_2	-294,65	-222,15	-222,60	-211,03	-212,36	-150,11	-143,03	-139,19	-139,96	-144,27	-135,92	-71,20	-71,88	-67,97	-67,95
<b>bbsr_2_3</b>	<b>-295,31</b>	<b>-222,78</b>	<b>-222,64</b>	<b>-211,90</b>	<b>-212,42</b>	<b>-150,15</b>	<b>-143,89</b>	<b>-139,39</b>	<b>-140,01</b>	<b>-144,34</b>	<b>-135,97</b>	<b>-71,40</b>	<b>-71,95</b>	<b>-67,97</b>	<b>-67,98</b>
bbsr_3_1	-294,21	-222,20	-222,16	-210,96	-211,86	-150,15	-142,99	-139,13	-139,90	-143,78	-135,90	-71,15	-71,81	-67,96	-67,95
bbsr_3_2	-294,02	-222,18	-221,95	-211,05	-211,58	-150,13	-142,99	-139,19	-139,91	-143,48	-135,92	-71,15	-71,83	-67,95	-67,95
bbsr_4_1	-294,29	-222,28	-222,23	-211,48	-211,85	-150,22	-143,50	-139,42	-139,88	-143,89	-135,92	-71,45	-71,93	-67,96	-67,96
bbss_1_1	-295,79	-223,88	-223,88	-212,06	-212,06	-151,97	-144,16	-140,09	-140,09	-144,16	-135,95	-72,20	-72,20	-67,97	-67,97
bbss_2_1	-296,21	-224,30	-223,85	-212,38	-212,10	-151,94	-144,49	-140,10	-140,13	-144,14	-135,93	-72,21	-72,17	-67,97	-67,96
bbss_1_3	-295,65	-223,85	-223,75	-212,13	-211,66	-151,95	-144,12	-140,17	-140,05	-143,78	-135,91	-72,15	-72,16	-67,95	-67,97
bbss_4_1	-295,77	-223,87	-223,88	-211,98	-212,10	-151,97	-144,09	-140,07	-140,13	-144,16	-135,94	-72,18	-72,20	-67,97	-67,97
<b>bbss_2_2</b>	<b>-296,62</b>	<b>-224,27</b>	<b>-224,27</b>	<b>-212,41</b>	<b>-212,41</b>	<b>-151,90</b>	<b>-144,47</b>	<b>-140,14</b>	<b>-140,14</b>	<b>-144,47</b>	<b>-135,90</b>	<b>-72,19</b>	<b>-72,19</b>	<b>-67,96</b>	<b>-67,96</b>
bbss_2_3	-296,06	-224,28	-223,73	-212,44	-211,70	-151,91	-144,44	-140,19	-140,09	-143,77	-135,89	-72,17	-72,14	-67,95	-67,96
bbss_2_4	-296,22	-224,30	-223,84	-212,44	-212,03	-151,94	-144,49	-140,15	-140,10	-144,06	-135,94	-72,21	-72,15	-67,97	-67,96
bbss_3_3	-295,53	-223,73	-223,73	-211,75	-211,75	-151,91	-143,74	-140,14	-140,14	-143,74	-135,89	-72,11	-72,11	-67,95	-67,95
bbss_3_4	-295,67	-223,75	-223,85	-211,73	-212,07	-151,95	-143,78	-140,10	-140,14	-144,03	-135,93	-72,16	-72,12	-67,97	-67,95
bbss_4_4	-295,75	-223,87	-223,87	-212,00	-212,00	-151,97	-144,08	-140,12	-140,12	-144,09	-135,91	-72,17	-72,18	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C64

Sub- struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL2 AL1
bbsr_1_1	-15,00	-10,93	-10,90	-4,07	-4,06	-6,83	-4,09	0,03	0,01	-4,07	0,00	-8,17	-6,84	-4,07	-4,10
bbsr_1_2	-15,32	-11,26	-11,23	-3,85	-4,20	-7,16	-3,89	0,03	-0,13	-4,07	0,01	-8,17	-7,36	-4,06	-4,09
bbsr_1_3	-15,61	-11,54	-10,96	-4,48	-4,14	-6,89	-4,51	0,03	-0,07	-4,06	-0,01	-8,71	-7,03	-4,07	-4,65
bbsr_1_4	-14,98	-10,91	-10,92	-4,03	-4,05	-6,85	-4,05	0,03	0,02	-4,06	-0,01	-8,12	-6,87	-4,07	-4,06
bbsr_2_1	-15,59	-11,56	-10,95	-4,51	-4,07	-6,91	-4,51	-0,02	-0,07	-4,00	0,01	-8,69	-7,07	-4,03	-4,63
bbsr_2_2	-15,66	-11,12	-11,55	-3,91	-4,57	-7,03	-3,88	-0,02	-0,13	-4,42	0,00	-8,62	-7,35	-4,54	-4,10
<b>bbsr_2_3</b>	<b>-16,01</b>	<b>-11,46</b>	<b>-11,34</b>	<b>-4,56</b>	<b>-4,52</b>	<b>-6,81</b>	<b>-4,51</b>	<b>-0,03</b>	<b>-0,08</b>	<b>-4,42</b>	<b>-0,02</b>	<b>-9,19</b>	<b>-7,08</b>	<b>-4,55</b>	<b>-4,68</b>
bbsr_3_1	-15,34	-11,30	-11,24	-3,90	-4,14	-7,19	-3,90	-0,02	-0,14	-4,01	0,01	-8,16	-7,43	-4,04	-4,10
bbsr_3_2	-15,13	-11,25	-11,01	-3,99	-3,85	-7,14	-3,89	-0,08	-0,13	-3,70	-0,01	-7,98	-7,55	-3,89	-4,13
bbsr_4_1	-15,00	-10,95	-10,90	-4,11	-4,00	-6,85	-4,09	-0,02	0,01	-4,01	0,00	-8,14	-6,90	-4,05	-4,10
bbss_1_1	-15,45	-11,51	-11,51	-3,93	-3,93	-7,58	-4,00	0,08	0,08	-4,00	-0,01	-7,87	-7,46	-3,94	-3,94
bbss_2_1	-15,90	-11,96	-11,49	-4,24	-4,00	-7,55	-4,32	0,08	0,00	-4,00	-0,01	-8,34	-7,58	-3,94	-4,41
bbss_1_3	-15,42	-11,57	-11,49	-4,06	-3,58	-7,64	-4,00	-0,07	0,08	-3,67	0,01	-7,79	-7,75	-3,85	-3,93
bbss_4_1	-15,47	-11,54	-11,54	-3,87	-3,97	-7,60	-3,95	0,08	0,03	-4,00	0,00	-7,86	-7,53	-3,93	-3,93
<b>bbss_2_2</b>	<b>-16,33</b>	<b>-11,94</b>	<b>-11,94</b>	<b>-4,31</b>	<b>-4,31</b>	<b>-7,53</b>	<b>-4,32</b>	<b>0,00</b>	<b>0,00</b>	<b>-4,33</b>	<b>0,01</b>	<b>-8,82</b>	<b>-7,68</b>	<b>-4,39</b>	<b>-4,39</b>
bbss_2_3	-15,85	-12,02	-11,47	-4,37	-3,65	-7,61	-4,32	-0,07	0,00	-3,67	0,02	-8,26	-7,85	-3,83	-4,38
bbss_2_4	-15,94	-11,99	-11,52	-4,31	-3,96	-7,58	-4,32	0,02	0,00	-3,95	-0,01	-8,35	-7,68	-3,95	-4,42
bbss_3_3	-15,40	-11,55	-11,55	-3,73	-3,73	-7,68	-3,67	-0,07	-0,07	-3,67	0,02	-7,73	-8,05	-3,85	-3,85
bbss_3_4	-15,47	-11,52	-11,60	-3,65	-4,02	-7,67	-3,67	0,03	-0,07	-3,94	-0,02	-7,78	-7,86	-3,95	-3,87
bbss_4_4	-15,47	-11,56	-11,56	-3,90	-3,90	-7,62	-3,94	0,02	0,02	-3,94	0,02	-7,87	-7,58	-3,91	-3,91

Fortsetzung Tabelle C64

Sub- struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bbsr_1_1	-9,68	-7,19	-7,16	0,41	-0,07	-4,66	-1,18	2,93	2,42	-1,66	3,15	1,33	0,84	1,58	1,57
bbsr_1_2	-9,59	-7,11	-7,09	0,93	-0,09	-4,60	-0,69	3,22	2,41	-1,55	3,17	1,61	0,95	1,59	1,57
bbsr_1_3	-10,23	-7,74	-7,14	0,04	-0,16	-4,64	-1,56	2,99	2,34	-1,64	3,12	1,39	0,85	1,56	1,57
bbsr_1_4	-9,66	-7,16	-7,17	0,46	-0,08	-4,67	-1,13	2,94	2,42	-1,66	3,13	1,35	0,83	1,57	1,57
bbsr_2_1	-10,19	-7,74	-7,11	0,02	-0,06	-4,64	-1,56	2,96	2,35	-1,56	3,15	1,40	0,87	1,56	1,58
bbsr_2_2	-10,01	-7,05	-7,50	0,83	-0,50	-4,55	-0,71	3,13	2,36	-1,95	3,16	1,58	0,90	1,59	1,57
<b>bbsr_2_3</b>	<b>-10,67</b>	<b>-7,68</b>	<b>-7,54</b>	<b>-0,04</b>	<b>-0,56</b>	<b>-4,59</b>	<b>-1,57</b>	<b>2,93</b>	<b>2,31</b>	<b>-2,02</b>	<b>3,11</b>	<b>1,38</b>	<b>0,83</b>	<b>1,56</b>	<b>1,57</b>
bbsr_3_1	-9,57	-7,10	-7,06	0,90	0,00	-4,59	-0,67	3,19	2,42	-1,46	3,18	1,63	0,97	1,59	1,58
bbsr_3_2	-9,38	-7,08	-6,85	0,81	0,28	-4,57	-0,67	3,13	2,41	-1,16	3,16	1,63	0,95	1,59	1,59
bbsr_4_1	-9,65	-7,18	-7,13	0,38	0,01	-4,66	-1,18	2,90	2,44	-1,57	3,16	1,33	0,85	1,58	1,58
bbss_1_1	-11,15	-8,78	-8,78	-0,20	-0,20	-6,41	-1,84	2,23	2,23	-1,84	3,13	0,58	0,58	1,57	1,57
bbss_2_1	-11,57	-9,20	-8,75	-0,52	-0,24	-6,38	-2,17	2,22	2,19	-1,82	3,15	0,57	0,61	1,58	1,57
bbss_1_3	-11,01	-8,75	-8,65	-0,27	0,20	-6,39	-1,80	2,15	2,27	-1,46	3,17	0,63	0,62	1,57	1,59
bbss_4_1	-11,13	-8,77	-8,78	-0,12	-0,24	-6,41	-1,77	2,25	2,19	-1,84	3,14	0,60	0,58	1,57	1,57
<b>bbss_2_2</b>	<b>-11,98</b>	<b>-9,17</b>	<b>-9,17</b>	<b>-0,55</b>	<b>-0,55</b>	<b>-6,34</b>	<b>-2,15</b>	<b>2,18</b>	<b>2,18</b>	<b>-2,15</b>	<b>3,18</b>	<b>0,59</b>	<b>0,59</b>	<b>1,58</b>	<b>1,58</b>
bbss_2_3	-11,42	-9,18	-8,63	-0,58	0,16	-6,35	-2,12	2,13	2,23	-1,45	3,19	0,61	0,64	1,58	1,59
bbss_2_4	-11,58	-9,20	-8,74	-0,58	-0,17	-6,38	-2,17	2,17	2,22	-1,74	3,14	0,57	0,63	1,58	1,57
bbss_3_3	-10,89	-8,63	-8,63	0,11	0,11	-6,35	-1,42	2,18	2,18	-1,42	3,19	0,67	0,67	1,59	1,59
bbss_3_4	-11,03	-8,65	-8,75	0,13	-0,21	-6,39	-1,46	2,22	2,18	-1,71	3,15	0,62	0,66	1,59	1,57
bbss_4_4	-11,11	-8,77	-8,77	-0,14	-0,14	-6,41	-1,76	2,20	2,20	-1,77	3,17	0,61	0,60	1,57	1,57

Abbildung C65 :

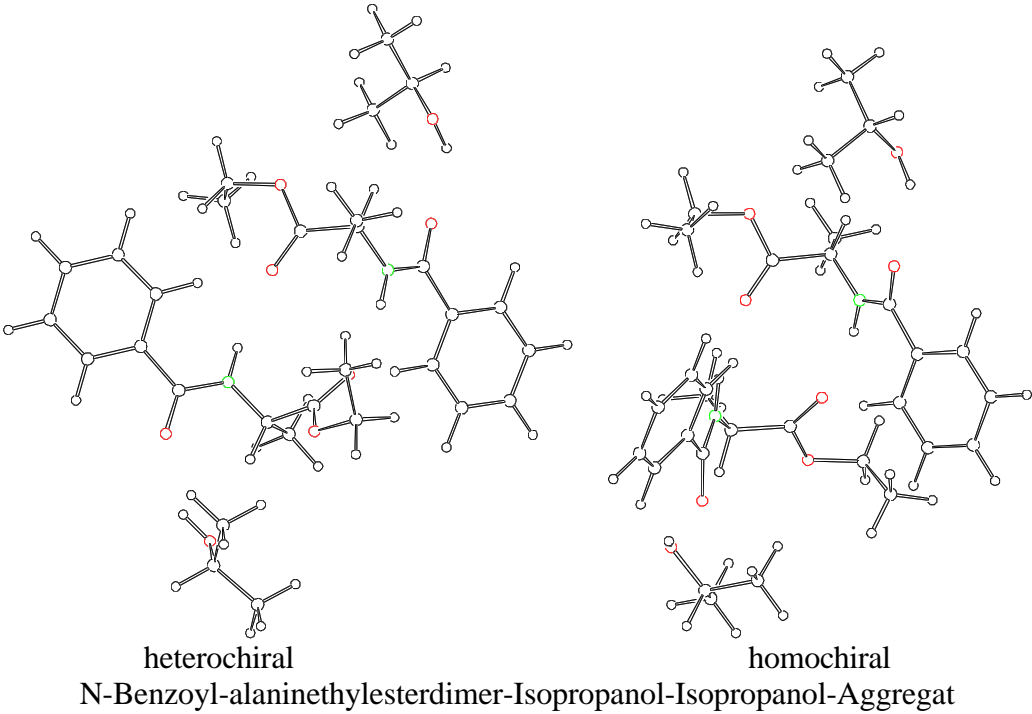


Tabelle C65 : Energien des N-Benzoyl-alaninethylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
besr_1_1	-363,44	-291,44	-291,44	-246,18	-245,52	-219,43	-178,19	-174,19	-173,56	-177,58	-135,93	-106,19	-105,61	-67,96	-67,97
besr_1_2	-364,26	-291,68	-292,22	-246,00	-245,98	-219,63	-177,99	-174,08	-173,54	-177,95	-135,94	-106,05	-105,49	-67,99	-67,97
besr_1_3	-363,68	-291,65	-291,63	-246,03	-245,13	-219,60	-177,96	-174,10	-173,32	-177,08	-135,91	-106,02	-105,27	-67,95	-67,97
besr_1_4	-363,78	-291,74	-291,73	-246,24	-245,99	-219,70	-178,23	-174,30	-174,02	-177,93	-135,93	-106,30	-105,97	-67,96	-67,96
besr_2_1	-363,24	-291,21	-291,44	-245,79	-245,61	-219,41	-177,82	-174,14	-173,60	-177,59	-135,93	-106,18	-105,58	-67,97	-67,95
besr_2_2	-363,83	-291,19	-292,00	-245,87	-246,03	-219,39	-177,80	-174,21	-173,54	-178,00	-135,96	-106,16	-105,53	-67,99	-67,95
besr_2_3	-363,18	-291,14	-291,36	-245,84	-245,15	-219,34	-177,74	-174,18	-173,33	-177,12	-135,92	-106,10	-105,32	-67,95	-67,95
besr_3_1	-363,85	-291,82	-291,42	-246,69	-245,93	-219,40	-178,72	-174,31	-173,91	-177,98	-135,96	-106,35	-105,98	-67,97	-67,98
<b>besr_3_2</b>	<b>-364,46</b>	<b>-291,82</b>	<b>-291,99</b>	<b>-246,66</b>	<b>-246,00</b>	<b>-219,37</b>	<b>-178,58</b>	<b>-174,27</b>	<b>-173,51</b>	<b>-178,02</b>	<b>-135,98</b>	<b>-106,22</b>	<b>-105,55</b>	<b>-67,99</b>	<b>-67,98</b>
bess_1_1	-364,49	-292,52	-292,52	-246,20	-246,20	-220,55	-178,27	-174,20	-174,21	-178,27	-135,94	-106,29	-106,29	-67,97	-67,97
bess_1_2	-364,92	-292,49	-292,95	-246,18	-246,59	-220,52	-178,26	-174,19	-174,22	-178,68	-135,94	-106,27	-106,30	-67,98	-67,97
bess_1_3	-364,26	-292,50	-292,30	-246,21	-245,77	-220,53	-178,22	-174,22	-174,17	-177,87	-135,91	-106,23	-106,25	-67,95	-67,97
bess_1_4	-364,47	-292,52	-292,51	-246,23	-246,12	-220,55	-178,26	-174,24	-174,17	-178,19	-135,94	-106,28	-106,25	-67,96	-67,97
<b>bess_2_2</b>	<b>-365,34</b>	<b>-292,92</b>	<b>-292,92</b>	<b>-246,58</b>	<b>-246,58</b>	<b>-220,48</b>	<b>-178,67</b>	<b>-174,21</b>	<b>-174,21</b>	<b>-178,67</b>	<b>-135,94</b>	<b>-106,29</b>	<b>-106,28</b>	<b>-67,98</b>	<b>-67,98</b>
bess_2_3	-364,69	-292,94	-292,27	-246,61	-245,77	-220,49	-178,64	-174,25	-174,17	-177,86	-135,91	-106,26	-106,25	-67,96	-67,98
bess_2_4	-364,92	-292,96	-292,48	-246,65	-246,11	-220,52	-178,67	-174,26	-174,16	-178,17	-135,96	-106,29	-106,23	-67,96	-67,98
bess_3_3	-364,06	-292,29	-292,29	-245,81	-245,81	-220,50	-177,82	-174,20	-174,20	-177,82	-135,90	-106,21	-106,21	-67,96	-67,96
bess_3_4	-364,27	-292,30	-292,49	-245,83	-246,13	-220,53	-177,85	-174,21	-174,18	-178,13	-135,93	-106,24	-106,19	-67,97	-67,95
bess_4_4	-364,45	-292,51	-292,51	-246,13	-246,13	-220,55	-178,18	-174,21	-174,21	-178,18	-135,91	-106,24	-106,24	-67,96	-67,96

# Fortsetzung Tabelle C65

Sub- struktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL2 AL1
besr_1_1	-15,71	-11,67	-11,68	-4,06	-3,98	-7,63	-4,03	-0,03	0,02	-4,00	0,00	-8,08	-7,68	-4,05	-4,03
besr_1_2	-16,76	-12,18	-12,70	-3,99	-4,54	-8,10	-3,97	-0,04	-0,08	-4,47	0,02	-8,68	-8,32	-4,58	-4,06
besr_1_3	-16,47	-12,39	-12,39	-4,09	-3,95	-8,30	-3,97	-0,12	-0,09	-3,87	0,01	-8,17	-8,64	-4,08	-4,08
besr_1_4	-15,58	-11,51	-11,50	-4,02	-4,09	-7,43	-3,97	-0,05	-0,09	-4,00	-0,01	-8,14	-7,62	-4,07	-4,09
besr_2_1	-15,55	-11,49	-11,70	-3,68	-4,10	-7,65	-3,69	0,01	-0,06	-4,04	0,00	-7,90	-7,83	-4,06	-3,85
besr_2_2	-16,20	-11,54	-12,33	-3,77	-4,57	-7,70	-3,68	-0,06	-0,06	-4,48	-0,02	-8,48	-8,04	-4,66	-3,87
besr_2_3	-15,86	-11,76	-11,99	-3,83	-3,93	-7,92	-3,68	-0,13	-0,06	-3,85	-0,01	-7,93	-8,33	-4,10	-3,87
besr_3_1	-15,57	-11,51	-11,13	-4,39	-4,01	-7,07	-4,39	0,01	0,04	-4,04	-0,01	-8,49	-7,14	-4,06	-4,45
<b>besr_3_2</b>	<b>-16,73</b>	<b>-12,07</b>	<b>-12,24</b>	<b>-4,48</b>	<b>-4,49</b>	<b>-7,60</b>	<b>-4,39</b>	<b>-0,07</b>	<b>0,02</b>	<b>-4,48</b>	<b>-0,02</b>	<b>-9,11</b>	<b>-7,86</b>	<b>-4,65</b>	<b>-4,49</b>
bess_1_1	-15,98	-11,98	-11,98	-3,98	-3,98	-7,98	-4,02	0,05	0,05	-4,02	-0,01	-8,00	-7,94	-4,00	-4,00
bess_1_2	-16,41	-11,95	-12,41	-3,97	-4,35	-7,95	-4,02	0,05	0,05	-4,40	0,00	-8,46	-7,99	-4,46	-4,00
bess_1_3	-15,86	-12,05	-11,87	-4,05	-3,60	-8,05	-4,02	-0,04	0,05	-3,66	0,01	-7,82	-8,18	-3,81	-3,99
bess_1_4	-16,01	-12,02	-12,01	-4,02	-3,93	-8,02	-4,02	0,00	0,05	-3,97	-0,01	-7,99	-8,02	-3,99	-4,00
<b>bess_2_2</b>	<b>-16,82</b>	<b>-12,38</b>	<b>-12,38</b>	<b>-4,34</b>	<b>-4,34</b>	<b>-7,91</b>	<b>-4,40</b>	<b>0,05</b>	<b>0,05</b>	<b>-4,40</b>	<b>0,02</b>	<b>-8,92</b>	<b>-8,01</b>	<b>-4,44</b>	<b>-4,44</b>
bess_2_3	-16,26	-12,46	-11,81	-4,43	-3,59	-7,99	-4,41	-0,04	0,05	-3,66	0,02	-8,29	-8,19	-3,80	-4,44
bess_2_4	-16,46	-12,45	-11,99	-4,41	-3,94	-8,00	-4,40	0,00	0,05	-3,97	-0,02	-8,45	-8,09	-4,00	-4,47
bess_3_3	-15,73	-11,92	-11,92	-3,69	-3,69	-8,09	-3,66	-0,04	-0,04	-3,66	0,01	-7,66	-8,41	-3,81	-3,81
bess_3_4	-15,93	-11,92	-12,10	-3,67	-4,03	-8,10	-3,66	0,00	-0,04	-3,97	-0,01	-7,81	-8,29	-4,01	-3,83
bess_4_4	-16,03	-12,06	-12,06	-3,96	-3,96	-8,06	-3,98	0,00	0,00	-3,98	0,02	-7,99	-8,08	-3,97	-3,97

# Fortsetzung Tabelle C65

Sub- struktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
besr_1_1	-10,54	-8,08	-8,08	-0,19	0,47	-5,61	-1,74	2,26	2,89	-1,13	3,15	0,72	1,30	1,57	1,58
besr_1_2	-11,36	-8,32	-8,86	-0,01	0,01	-5,81	-1,54	2,37	2,91	-1,50	3,14	0,86	1,42	1,57	1,55
besr_1_3	-10,78	-8,29	-8,27	-0,04	0,86	-5,78	-1,51	2,35	3,13	-0,63	3,17	0,89	1,64	1,57	1,59
besr_1_4	-10,88	-8,38	-8,37	-0,25	0,00	-5,88	-1,78	2,15	2,43	-1,48	3,15	0,61	0,94	1,58	1,58
besr_2_1	-10,34	-7,85	-8,08	0,20	0,38	-5,59	-1,37	2,31	2,85	-1,14	3,15	0,73	1,33	1,59	1,57
besr_2_2	-10,93	-7,83	-8,64	0,12	-0,04	-5,57	-1,35	2,24	2,91	-1,55	3,12	0,75	1,38	1,59	1,55
besr_2_3	-10,28	-7,78	-8,00	0,15	0,84	-5,52	-1,29	2,27	3,12	-0,67	3,16	0,81	1,59	1,59	1,59
besr_3_1	-10,95	-8,46	-8,06	-0,70	0,06	-5,58	-2,27	2,14	2,54	-1,53	3,12	0,56	0,93	1,56	1,57
<b>besr_3_2</b>	<b>-11,56</b>	<b>-8,46</b>	<b>-8,63</b>	<b>-0,67</b>	<b>-0,01</b>	<b>-5,55</b>	<b>-2,13</b>	<b>2,18</b>	<b>2,94</b>	<b>-1,57</b>	<b>3,10</b>	<b>0,69</b>	<b>1,36</b>	<b>1,56</b>	<b>1,55</b>
bess_1_1	-11,59	-9,16	-9,16	-0,21	-0,21	-6,73	-1,82	2,25	2,24	-1,82	3,14	0,62	0,62	1,57	1,57
bess_1_2	-12,02	-9,13	-9,59	-0,19	-0,60	-6,70	-1,81	2,26	2,23	-2,23	3,14	0,64	0,61	1,57	1,56
bess_1_3	-11,36	-9,14	-8,94	-0,22	0,22	-6,71	-1,77	2,23	2,28	-1,42	3,17	0,68	0,66	1,57	1,59
bess_1_4	-11,57	-9,16	-9,15	-0,24	-0,13	-6,73	-1,81	2,21	2,28	-1,74	3,14	0,63	0,66	1,57	1,58
<b>bess_2_2</b>	<b>-12,44</b>	<b>-9,56</b>	<b>-9,56</b>	<b>-0,59</b>	<b>-0,59</b>	<b>-6,66</b>	<b>-2,22</b>	<b>2,24</b>	<b>2,24</b>	<b>-2,22</b>	<b>3,14</b>	<b>0,62</b>	<b>0,63</b>	<b>1,56</b>	<b>1,56</b>
bess_2_3	-11,79	-9,58	-8,91	-0,62	0,22	-6,67	-2,19	2,20	2,28	-1,41	3,17	0,65	0,66	1,56	1,58
bess_2_4	-12,02	-9,60	-9,12	-0,66	-0,12	-6,70	-2,22	2,19	2,29	-1,72	3,12	0,62	0,68	1,56	1,58
bess_3_3	-11,16	-8,93	-8,93	0,18	0,18	-6,68	-1,37	2,25	2,25	-1,37	3,18	0,70	0,70	1,58	1,58
bess_3_4	-11,37	-8,94	-9,13	0,16	-0,14	-6,71	-1,40	2,24	2,27	-1,68	3,15	0,67	0,72	1,59	1,57
bess_4_4	-11,55	-9,15	-9,15	-0,14	-0,14	-6,73	-1,73	2,24	2,24	-1,73	3,17	0,67	0,67	1,58	1,58

Abbildung C66 :

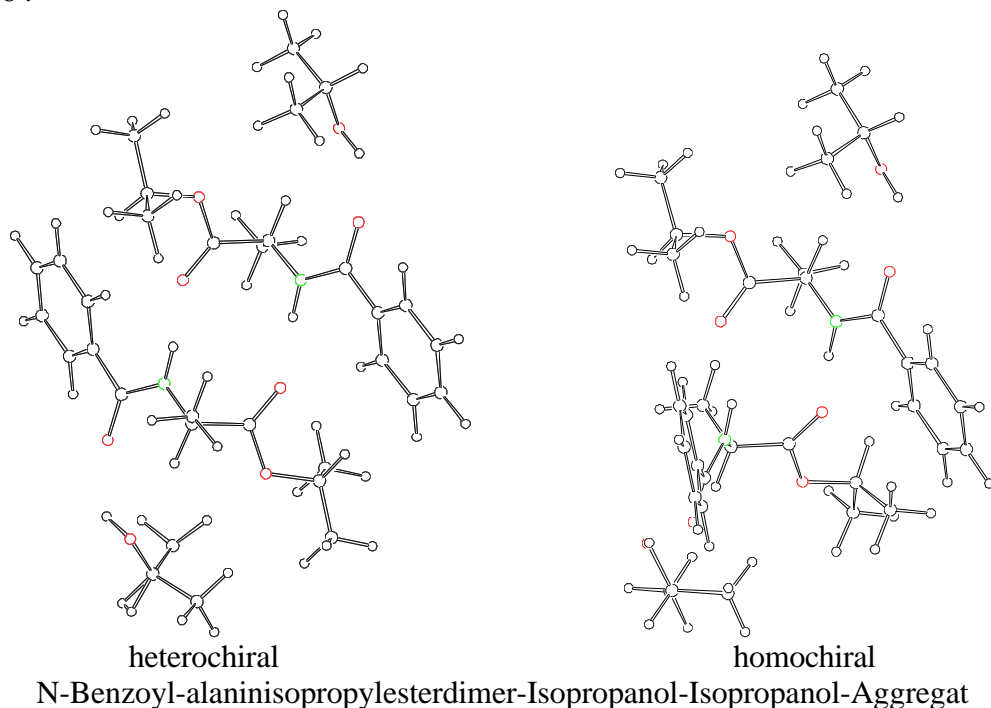


Tabelle C66 : Energien des N-Benzoyl-alaninisopropylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bisr_1_1	-372,30	-300,20	-300,23	-250,04	-250,15	-228,13	-182,04	-178,08	-178,09	-182,09	-135,93	-110,08	-110,04	-67,96	-67,97
bisr_1_2	-371,96	-299,86	-300,15	-249,44	-250,08	-228,05	-181,45	-177,86	-178,04	-181,98	-135,93	-109,86	-109,93	-67,96	-67,98
bisr_1_3	-372,71	-300,62	-300,17	-250,35	-249,89	-228,06	-182,36	-177,85	-177,84	-181,99	-135,91	-109,85	-109,94	-67,96	-67,96
bisr_1_4	-372,25	-300,16	-300,23	-250,03	-250,10	-228,13	-182,03	-178,02	-178,05	-182,12	-135,93	-110,03	-110,07	-67,96	-67,97
bisr_2_1	-372,67	-300,62	-300,13	-250,38	-249,80	-228,06	-182,35	-177,89	-177,87	-181,91	-135,90	-109,83	-109,96	-67,97	-67,96
bisr_2_2	-372,37	-300,58	-299,79	-250,33	-249,42	-228,03	-182,30	-177,79	-177,79	-181,50	-135,92	-109,78	-109,89	-67,95	-67,96
<b>bisr_2_3</b>	<b>-373,04</b>	<b>-300,58</b>	<b>-64,29</b>	<b>-15,02</b>	<b>-13,71</b>	<b>-228,03</b>	<b>-182,31</b>	<b>57,47</b>	<b>-177,75</b>	<b>54,15</b>	<b>99,49</b>	<b>-109,79</b>	<b>-109,85</b>	<b>167,40</b>	<b>-67,96</b>
bisr_3_1	-371,94	-300,13	-299,88	-249,93	-249,53	-228,06	-181,90	-177,98	-177,91	-181,49	-135,91	-109,94	-109,85	-67,95	-67,97
bisr_3_2	-371,62	-299,82	-299,79	-249,43	-249,59	-228,01	-181,38	-177,81	-177,96	-181,47	-135,95	-109,79	-109,86	-67,95	-67,98
bisr_4_1	-372,28	-300,20	-300,20	-250,11	-250,11	-228,13	-182,04	-178,14	-178,14	-182,04	-135,94	-110,09	-110,08	-67,97	-67,97
biss_1_1	-372,95	-300,97	-300,97	-249,89	-249,89	-228,97	-181,95	-177,89	-177,89	-181,95	-135,94	-109,94	-109,94	-67,97	-67,97
biss_1_2	-373,48	-300,93	-301,47	-249,84	-250,32	-228,93	-181,93	-177,82	-177,84	-182,37	-135,93	-109,92	-109,90	-67,95	-67,97
biss_1_3	-372,74	-300,94	-300,74	-249,95	-249,51	-228,95	-181,91	-177,94	-177,93	-181,57	-135,92	-109,91	-109,98	-67,95	-67,97
biss_1_4	-372,99	-300,97	-301,02	-249,97	-249,87	-228,97	-181,92	-177,98	-177,95	-181,95	-135,92	-109,92	-110,00	-67,97	-67,97
<b>biss_2_2</b>	<b>-373,96</b>	<b>-301,44</b>	<b>-301,44</b>	<b>-250,24</b>	<b>-250,24</b>	<b>-228,89</b>	<b>-182,36</b>	<b>-177,78</b>	<b>-177,78</b>	<b>-182,36</b>	<b>-135,87</b>	<b>-109,88</b>	<b>-109,88</b>	<b>-67,95</b>	<b>-67,95</b>
biss_2_3	-373,23	-301,45	-300,70	-250,35	-249,43	-228,91	-182,35	-177,90	-177,87	-181,55	-135,88	-109,87	-109,97	-67,95	-67,95
biss_2_4	-373,54	-301,47	-300,98	-250,44	-249,84	-228,93	-182,36	-177,94	-177,88	-181,92	-135,93	-109,88	-109,98	-67,97	-67,95
biss_3_3	-372,48	-300,69	-300,70	-249,52	-249,65	-228,91	-181,50	-178,00	-178,07	-181,54	-135,92	-109,97	-109,96	-67,95	-67,98
biss_3_4	-372,81	-301,00	-300,74	-249,95	-249,63	-228,95	-181,90	-177,99	-178,02	-181,55	-135,94	-109,96	-109,96	-67,95	-67,97
biss_4_4	-373,05	-301,02	-301,02	-249,96	-249,96	-228,96	-181,92	-178,04	-178,04	-181,92	-135,91	-109,98	-109,98	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C66

Sub- struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL2 AL1
bisr_1_1	-16,25	-12,11	-12,14	-4,03	-4,18	-8,00	-3,99	-0,03	-0,08	-4,09	-0,01	-8,24	-8,16	-4,14	-4,11
bisr_1_2	-16,23	-12,10	-12,40	-3,64	-4,22	-8,26	-3,61	-0,04	-0,13	-4,09	0,01	-7,98	-8,52	-4,14	-3,83
bisr_1_3	-17,01	-12,88	-12,42	-4,58	-4,04	-8,28	-4,56	-0,04	0,05	-4,09	0,01	-8,75	-8,36	-4,13	-4,59
bisr_1_4	-16,22	-12,09	-12,17	-4,07	-4,10	-8,03	-4,04	-0,03	-0,01	-4,09	0,00	-8,19	-8,09	-4,14	-4,05
bisr_2_1	-16,95	-12,87	-12,37	-4,63	-3,92	-8,27	-4,56	-0,09	0,05	-3,98	0,02	-8,71	-8,41	-4,08	-4,58
bisr_2_2	-16,79	-12,95	-12,16	-4,64	-3,61	-8,35	-4,57	-0,05	0,06	-3,65	-0,01	-8,42	-8,56	-3,83	-4,62
<b>bisr_2_3</b>	<b>-252,84</b>	<b>-12,99</b>	<b>-12,05</b>	<b>-4,67</b>	<b>-3,30</b>	<b>-8,39</b>	<b>-4,57</b>	<b>-0,14</b>	<b>0,06</b>	<b>-3,40</b>	<b>0,05</b>	<b>-244,50</b>	<b>-244,87</b>	<b>-239,85</b>	<b>-240,79</b>
bisr_3_1	-16,23	-12,37	-12,13	-4,06	-3,76	-8,26	-3,98	-0,09	-0,09	-3,68	0,01	-7,97	-8,56	-3,86	-4,09
bisr_3_2	-16,04	-12,19	-12,18	-3,70	-3,80	-8,36	-3,62	-0,06	-0,12	-3,66	-0,02	-7,66	-8,77	-3,85	-3,86
bisr_4_1	-16,18	-12,07	-12,07	-4,09	-4,09	-7,96	-3,99	-0,09	-0,09	-3,99	-0,01	-8,21	-8,20	-4,12	-4,12
biss_1_1	-17,14	-13,12	-13,12	-4,02	-4,02	-9,09	-4,04	0,02	0,02	-4,04	0,00	-8,04	-9,06	-4,02	-4,02
biss_1_2	-17,74	-13,14	-13,71	-4,01	-4,51	-9,11	-4,04	0,05	0,02	-4,53	-0,01	-8,62	-9,18	-4,61	-4,04
biss_1_3	-16,93	-13,09	-12,90	-4,12	-3,61	-9,06	-4,04	-0,08	0,02	-3,64	0,00	-7,87	-9,26	-3,84	-4,03
biss_1_4	-17,14	-13,08	-13,13	-4,11	-3,94	-9,05	-4,04	-0,09	0,02	-3,98	0,02	-8,11	-9,12	-4,06	-4,01
<b>biss_2_2</b>	<b>-18,30</b>	<b>-13,73</b>	<b>-13,73</b>	<b>-4,46</b>	<b>-4,46</b>	<b>-9,13</b>	<b>-4,53</b>	<b>0,05</b>	<b>0,05</b>	<b>-4,53</b>	<b>0,02</b>	<b>-9,19</b>	<b>-9,24</b>	<b>-4,57</b>	<b>-4,57</b>
biss_2_3	-17,49	-13,67	-12,91	-4,59	-3,56	-9,07	-4,53	-0,08	0,05	-3,63	0,03	-8,45	-9,33	-3,82	-4,58
biss_2_4	-17,77	-13,67	-13,15	-4,64	-3,95	-9,07	-4,53	-0,09	0,05	-3,98	-0,02	-8,68	-9,26	-4,10	-4,62
biss_3_3	<b>-16,62</b>	<b>-12,79</b>	<b>-12,82</b>	<b>-3,63</b>	<b>-3,76</b>	<b>-8,99</b>	<b>-3,55</b>	<b>-0,08</b>	<b>-0,13</b>	<b>-3,63</b>	<b>0,00</b>	<b>-7,64</b>	<b>-9,44</b>	<b>-3,83</b>	<b>-3,80</b>
biss_3_4	-16,97	-13,11	-12,86	-4,07	-3,75	-9,02	-3,97	-0,08	-0,09	-3,63	-0,02	-7,93	-9,36	-3,86	-4,11
biss_4_4	-17,16	-13,10	-13,10	-4,05	-4,05	-9,01	-3,97	-0,10	-0,10	-3,97	0,03	-8,18	-9,21	-4,06	-4,06

Fortsetzung Tabelle C66

Sub- struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bisr_1_1	-11,48	-8,92	-8,95	-0,09	-0,20	-6,39	-1,63	2,33	2,32	-1,68	3,15	0,79	0,83	1,57	1,58
bisr_1_2	-11,14	-8,58	-8,87	0,51	-0,13	-6,31	-1,04	2,55	2,37	-1,57	3,15	1,01	0,94	1,56	1,58
bisr_1_3	-11,89	-9,34	-8,89	-0,40	0,06	-6,32	-1,95	2,56	2,57	-1,58	3,17	1,02	0,93	1,58	1,58
bisr_1_4	-11,43	-8,88	-8,95	-0,08	-0,15	-6,39	-1,62	2,39	2,36	-1,71	3,15	0,84	0,80	1,57	1,58
bisr_2_1	-11,85	-9,34	-8,85	-0,43	0,15	-6,32	-1,94	2,52	2,54	-1,50	3,18	1,04	0,91	1,58	1,57
bisr_2_2	-11,55	-9,30	-8,51	-0,38	0,53	-6,29	-1,89	2,62	2,62	-1,09	3,16	1,09	0,98	1,58	1,59
<b>bisr_2_3</b>	<b>-12,22</b>	<b>-9,30</b>	<b>226,99</b>	<b>234,93</b>	<b>236,24</b>	<b>-6,29</b>	<b>-1,90</b>	<b>237,88</b>	<b>2,66</b>	<b>234,56</b>	<b>238,57</b>	<b>1,08</b>	<b>1,02</b>	<b>1,58</b>	<b>236,94</b>
bisr_3_1	-11,12	-8,85	-8,60	0,02	0,42	-6,32	-1,49	2,43	2,50	-1,08	3,17	0,93	1,02	1,57	1,59
bisr_3_2	-10,80	-8,54	-8,51	0,52	0,36	-6,27	-0,97	2,60	2,45	-1,06	3,13	1,08	1,01	1,56	1,59
bisr_4_1	-11,46	-8,92	-8,92	-0,16	-0,16	-6,39	-1,63	2,27	2,27	-1,63	3,14	0,78	0,79	1,57	1,57
biss_1_1	-12,13	-9,69	-9,69	0,06	0,06	-7,23	-1,54	2,52	2,52	-1,54	3,14	0,93	0,93	1,57	1,57
biss_1_2	-12,66	-9,65	-10,19	0,11	-0,37	-7,19	-1,52	2,59	2,57	-1,96	3,15	0,95	0,97	1,57	1,59
biss_1_3	-11,92	-9,66	-9,46	0,00	0,44	-7,21	-1,50	2,47	2,48	-1,16	3,16	0,96	0,89	1,57	1,59
biss_1_4	-12,17	-9,69	-9,74	-0,02	0,08	-7,23	-1,51	2,43	2,46	-1,54	3,16	0,95	0,87	1,57	1,57
<b>biss_2_2</b>	<b>-13,14</b>	<b>-10,16</b>	<b>-10,16</b>	<b>-0,29</b>	<b>-0,29</b>	<b>-7,15</b>	<b>-1,95</b>	<b>2,63</b>	<b>2,63</b>	<b>-1,95</b>	<b>3,21</b>	<b>0,99</b>	<b>0,99</b>	<b>1,59</b>	<b>1,59</b>
biss_2_3	-12,41	-10,17	-9,42	-0,40	0,52	-7,17	-1,94	2,51	2,54	-1,14	3,20	1,00	0,90	1,59	1,59
biss_2_4	-12,72	-10,19	-9,70	-0,49	0,11	-7,19	-1,95	2,47	2,53	-1,51	3,15	0,99	0,89	1,59	1,57
biss_3_3	-11,66	-9,41	-9,42	0,43	0,30	-7,17	-1,09	2,41	2,34	-1,13	3,16	0,90	0,91	1,56	1,59
biss_3_4	-11,99	-9,72	-9,46	0,00	0,32	-7,21	-1,49	2,42	2,39	-1,14	3,14	0,91	0,91	1,57	1,59
biss_4_4	-12,23	-9,74	-9,74	-0,01	-0,01	-7,22	-1,51	2,37	2,37	-1,51	3,17	0,89	0,89	1,57	1,57



Abbildung C67 :

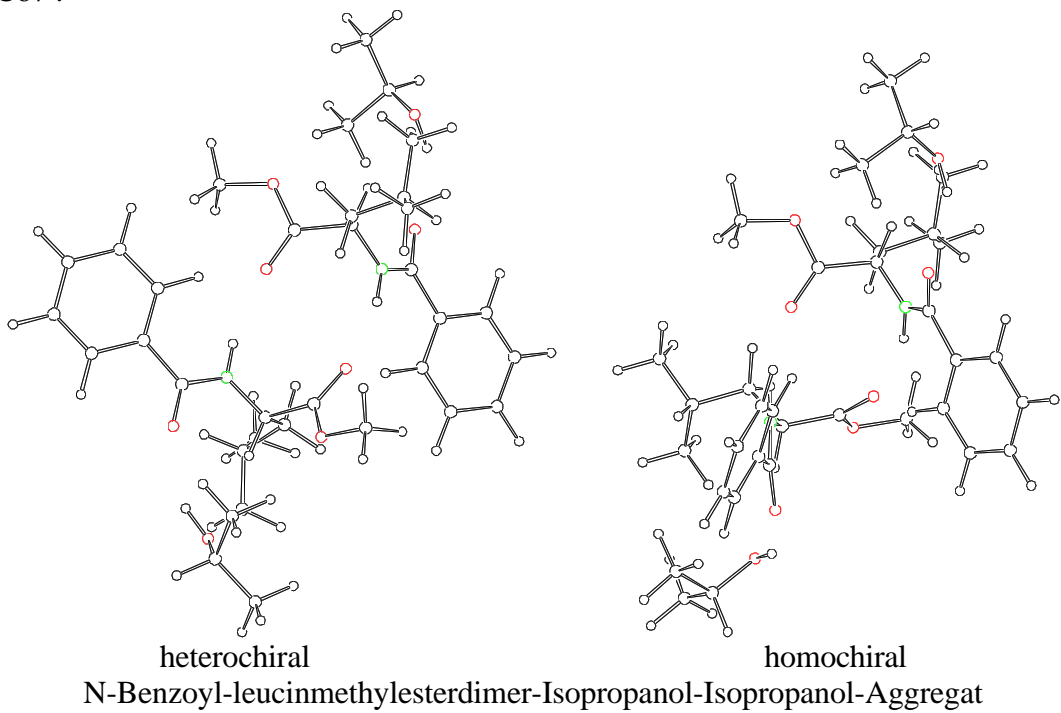


Tabelle C67 : Energien des N-Benzoyl-leucinmethylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
blsr_1_1	-386,53	-314,41	-314,40	-257,85	-257,68	-242,27	-189,91	-185,78	-185,58	-189,68	-135,92	-117,84	-117,57	-67,95	-67,97
blsr_1_2	-387,25	-314,91	-314,39	-258,35	-257,56	-242,04	-190,40	-185,50	-185,22	-189,60	-135,97	-117,55	-117,27	-67,97	-68,00
blsr_1_3	-387,00	-314,21	-314,87	-257,94	-257,52	-242,07	-189,83	-185,87	-184,94	-189,52	-135,94	-117,75	-116,93	-67,98	-67,97
blsr_1_4	-386,57	-314,35	-314,43	-257,88	-257,73	-242,20	-189,91	-185,80	-185,52	-189,71	-135,94	-117,83	-117,51	-67,97	-67,97
blsr_2_1	-386,93	-314,81	-314,34	-258,01	-257,66	-242,21	-190,08	-185,58	-185,56	-189,60	-135,94	-117,64	-117,49	-67,95	-67,99
blsr_2_2	-387,70	-314,87	-314,80	-258,45	-257,40	-241,99	-190,32	-185,59	-184,78	-189,43	-135,98	-117,47	-116,82	-67,98	-68,00
blsr_2_3	-387,46	-314,62	-314,83	-258,15	-257,52	-242,03	-190,01	-185,69	-184,88	-189,43	-135,98	-117,58	-116,82	-67,98	-67,99
blsr_3_1	-387,12	-314,11	-315,11	-257,68	-257,87	-242,10	-189,63	-185,67	-184,95	-189,93	-135,97	-117,63	-117,02	-67,99	-67,97
<b>blsr_3_2</b>	<b>-387,94</b>	<b>-314,89</b>	<b>-315,04</b>	<b>-258,43</b>	<b>-257,83</b>	<b>-242,01</b>	<b>-190,37</b>	<b>-185,56</b>	<b>-184,89</b>	<b>-189,86</b>	<b>-136,01</b>	<b>-117,52</b>	<b>-116,94</b>	<b>-67,99</b>	<b>-68,00</b>
blsr_4_1	-386,23	-314,20	-314,22	-257,62	-257,20	-242,19	-189,67	-185,61	-185,18	-189,26	-135,94	-117,67	-117,24	-67,97	-67,97
blss_1_1	-386,93	-314,84	-314,84	-257,88	-257,88	-242,75	-189,93	-185,81	-185,81	-189,93	-135,91	-117,87	-117,87	-67,95	-67,95
blss_2_1	-387,82	-315,88	-314,85	-258,02	-257,35	-242,92	-190,15	-185,12	-185,34	-189,39	-135,97	-117,24	-117,39	-67,97	-67,99
blss_3_1	-387,54	-315,61	-314,90	-257,86	-257,52	-242,96	-189,98	-185,42	-185,52	-189,48	-135,94	-117,53	-117,47	-67,97	-67,98
blss_1_4	-386,97	-314,87	-314,90	-257,90	-257,79	-242,79	-189,92	-185,83	-185,70	-189,84	-135,93	-117,85	-117,76	-67,97	-67,95
blss_2_2	-388,38	-315,10	-315,50	-259,62	-256,14	-242,24	-190,14	-186,74	-184,60	-188,25	-135,98	-117,29	-116,70	-67,99	-67,99
<b>blss_2_3</b>	<b>-388,51</b>	<b>-315,83</b>	<b>-315,58</b>	<b>-258,16</b>	<b>-257,79</b>	<b>-242,87</b>	<b>-190,14</b>	<b>-185,29</b>	<b>-185,30</b>	<b>-189,87</b>	<b>-135,95</b>	<b>-117,25</b>	<b>-117,35</b>	<b>-67,98</b>	<b>-67,99</b>
blss_2_4	-387,84	-315,88	-314,86	-258,12	-257,21	-242,92	-190,13	-185,21	-185,29	-189,25	-135,97	-117,23	-117,34	-67,97	-67,99
blss_3_3	-388,21	-315,56	-315,56	-257,99	-257,99	-242,90	-189,95	-185,54	-185,54	-189,95	-135,95	-117,48	-117,48	-67,98	-67,98
blss_3_4	-387,62	-314,98	-315,52	-257,74	-258,00	-242,90	-189,69	-185,65	-185,53	-190,02	-135,97	-117,61	-117,56	-67,98	-67,98
blss_4_4	-387,01	-314,93	-314,93	-257,79	-257,79	-242,83	-189,82	-185,72	-185,72	-189,82	-135,94	-117,74	-117,74	-67,98	-67,97

Fortsetzung Tabelle C67

Sub- struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL2 AL1
blsr_1_1	-15,21	-11,03	-11,05	-4,10	-4,19	-6,86	-4,11	0,01	-0,04	-4,16	0,00	-8,35	-6,94	-4,18	-4,16
blsr_1_2	-16,47	-12,09	-11,60	-4,84	-4,32	-7,22	-4,85	0,01	0,05	-4,36	0,00	-9,24	-7,25	-4,37	-4,86
blsr_1_3	-16,37	-11,56	-12,21	-4,24	-4,64	-7,39	-4,11	-0,14	-0,05	-4,61	0,01	-8,99	-7,65	-4,80	-4,16
blsr_1_4	-15,30	-11,04	-11,13	-4,11	-4,28	-6,87	-4,11	0,00	-0,04	-4,23	0,00	-8,43	-6,95	-4,26	-4,17
blsr_2_1	-15,85	-11,68	-11,24	-4,43	-4,23	-7,08	-4,45	0,02	-0,08	-4,15	0,00	-8,78	-7,25	-4,17	-4,61
blsr_2_2	-17,43	-12,58	-12,53	-5,00	-4,60	-7,70	-4,85	-0,14	0,04	-4,63	0,00	-9,73	-7,95	-4,85	-4,90
blsr_2_3	-17,09	-12,23	-12,45	-4,61	-4,73	-7,63	-4,45	-0,13	-0,08	-4,63	-0,02	-9,45	-8,02	-4,86	-4,64
blsr_3_1	-16,51	-11,49	-12,47	-4,08	-4,88	-7,46	-4,03	-0,05	0,03	-4,92	0,00	-9,05	-7,56	-5,02	-4,04
<b>blsr_3_2</b>	<b>-17,49</b>	<b>-12,43</b>	<b>-12,59</b>	<b>-4,92</b>	<b>-4,90</b>	<b>-7,56</b>	<b>-4,85</b>	<b>-0,05</b>	<b>0,04</b>	<b>-4,93</b>	<b>-0,02</b>	<b>-9,91</b>	<b>-7,71</b>	<b>-5,06</b>	<b>-4,90</b>
blsr_4_1	-15,38	-11,32	-11,34	-4,02	-4,02	-7,28	-4,03	0,02	0,03	-4,05	-0,01	-8,09	-7,30	-4,06	-4,04
blss_1_1	-15,29	-11,16	-11,16	-4,11	-4,11	-7,02	-4,12	0,01	0,01	-4,12	-0,01	-8,26	-7,06	-4,14	-4,14
blss_2_1	-17,23	-13,26	-12,25	-4,82	-4,00	-8,29	-4,91	0,09	0,04	-4,04	-0,01	-8,94	-8,28	-3,97	-4,97
blss_3_1	-16,60	-12,63	-11,94	-4,38	-4,10	-7,96	-4,48	0,08	-0,07	-4,04	0,01	-8,65	-8,08	-3,97	-4,66
blss_1_4	-15,44	-11,31	-11,31	-4,13	-4,10	-7,18	-4,12	-0,01	0,01	-4,11	0,00	-8,25	-7,21	-4,13	-4,13
blss_2_2	-18,40	-13,12	-13,52	-6,34	-3,45	-8,25	-4,86	-1,46	0,09	-3,56	0,01	-10,16	-9,98	-5,28	-4,88
<b>blss_2_3</b>	<b>-17,95</b>	<b>-13,24</b>	<b>-13,01</b>	<b>-4,95</b>	<b>-4,48</b>	<b>-8,27</b>	<b>-4,90</b>	<b>-0,07</b>	<b>0,05</b>	<b>-4,55</b>	<b>0,02</b>	<b>-9,69</b>	<b>-8,50</b>	<b>-4,71</b>	<b>-4,94</b>
blss_2_4	-17,31	-13,32	-12,33	-4,93	-3,91	-8,35	-4,91	-0,01	0,05	-3,94	-0,01	-8,94	-8,45	-3,99	-4,98
blss_3_3	-17,28	-12,62	-12,62	-4,54	-4,54	-7,94	-4,49	-0,07	-0,07	-4,48	0,01	-9,36	-8,31	-4,66	-4,66
blss_3_4	-16,49	-11,83	-12,37	-4,17	-4,49	-7,72	-4,10	-0,05	0,01	-4,48	-0,01	-8,75	-7,91	-4,66	-4,12
blss_4_4	-15,59	-11,48	-11,48	-4,11	-4,11	-7,36	-4,11	-0,01	-0,01	-4,11	0,01	-8,25	-7,37	-4,11	-4,11

Fortsetzung Tabelle C67

Sub- struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
blsr_1_1	-10,69	-8,11	-8,10	-0,39	-0,22	-5,51	-1,99	2,14	2,34	-1,76	3,16	0,54	0,81	1,57	1,59
blsr_1_2	-11,41	-8,61	-8,09	-0,89	-0,10	-5,28	-2,48	2,42	2,70	-1,68	3,11	0,83	1,11	1,54	1,57
blsr_1_3	-11,16	-7,91	-8,57	-0,48	-0,06	-5,31	-1,91	2,05	2,98	-1,60	3,14	0,63	1,45	1,57	1,56
blsr_1_4	-10,73	-8,05	-8,13	-0,42	-0,27	-5,44	-1,99	2,12	2,40	-1,79	3,14	0,55	0,87	1,57	1,57
blsr_2_1	-11,09	-8,51	-8,04	-0,55	-0,20	-5,45	-2,16	2,34	2,36	-1,68	3,14	0,74	0,89	1,55	1,59
blsr_2_2	-11,86	-8,57	-8,50	-0,99	0,06	-5,23	-2,40	2,33	3,15	-1,51	3,10	0,91	1,56	1,54	1,56
blsr_2_3	-11,62	-8,32	-8,53	-0,69	-0,06	-5,27	-2,09	2,23	3,04	-1,51	3,10	0,80	1,56	1,55	1,56
blsr_3_1	-11,28	-7,81	-8,81	-0,22	-0,41	-5,34	-1,71	2,25	2,97	-2,01	3,11	0,75	1,36	1,57	1,55
<b>blsr_3_2</b>	<b>-12,10</b>	<b>-8,59</b>	<b>-8,74</b>	<b>-0,97</b>	<b>-0,37</b>	<b>-5,25</b>	<b>-2,45</b>	<b>2,36</b>	<b>3,03</b>	<b>-1,94</b>	<b>3,07</b>	<b>0,86</b>	<b>1,44</b>	<b>1,54</b>	<b>1,55</b>
blsr_4_1	-10,39	-7,90	-7,92	-0,16	0,26	-5,43	-1,75	2,31	2,74	-1,34	3,14	0,71	1,14	1,57	1,57
blss_1_1	-11,09	-8,54	-8,54	-0,42	-0,42	-5,99	-2,01	2,11	2,11	-2,01	3,17	0,51	0,51	1,59	1,59
blss_2_1	-11,98	-9,58	-8,55	-0,56	0,11	-6,16	-2,23	2,80	2,58	-1,47	3,11	1,14	0,99	1,55	1,57
blss_3_1	-11,70	-9,31	-8,60	-0,40	-0,06	-6,20	-2,06	2,50	2,40	-1,56	3,14	0,85	0,91	1,56	1,57
blss_1_4	-11,13	-8,57	-8,60	-0,44	-0,33	-6,03	-2,00	2,09	2,22	-1,92	3,15	0,53	0,62	1,59	1,57
blss_2_2	-12,54	-8,80	-9,20	-2,16	1,32	-5,48	-2,22	1,18	3,32	-0,33	3,10	1,09	1,68	1,55	1,55
<b>blss_2_3</b>	<b>-12,67</b>	<b>-9,53</b>	<b>-9,28</b>	<b>-0,70</b>	<b>-0,33</b>	<b>-6,11</b>	<b>-2,22</b>	<b>2,63</b>	<b>2,62</b>	<b>-1,95</b>	<b>3,13</b>	<b>1,13</b>	<b>1,03</b>	<b>1,55</b>	<b>1,56</b>
blss_2_4	-12,00	-9,58	-8,56	-0,66	0,25	-6,16	-2,21	2,71	2,63	-1,33	3,11	1,15	1,04	1,55	1,57
blss_3_3	-12,37	-9,26	-9,26	-0,53	-0,53	-6,14	-2,03	2,38	2,38	-2,03	3,13	0,90	0,90	1,56	1,56
blss_3_4	-11,78	-8,68	-9,22	-0,28	-0,54	-6,14	-1,77	2,27	2,39	-2,10	3,11	0,77	0,82	1,56	1,56
blss_4_4	-11,17	-8,63	-8,63	-0,33	-0,33	-6,07	-1,90	2,20	2,20	-1,90	3,14	0,64	0,64	1,57	1,56

Abbildung C68 :

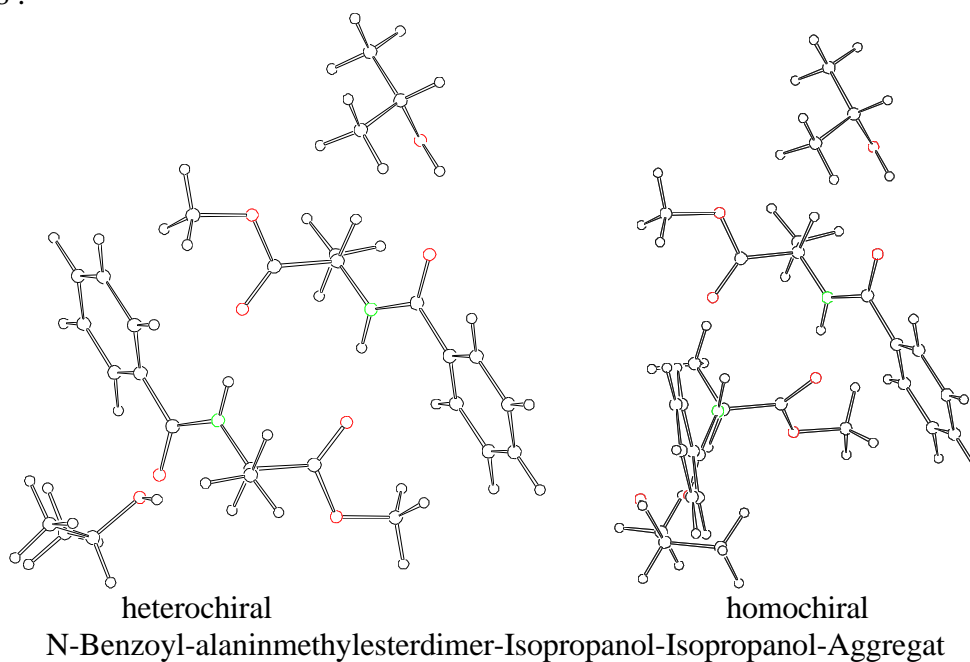


Tabelle C68 : Energien des N-Benzoyl-alaninmethylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub-struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bmsr_1_1	-352,39	-280,37	-280,39	-240,21	-240,12	-208,36	-172,15	-168,22	-168,21	-172,15	-135,93	-100,16	-100,23	-67,96	-67,97
bmsr_1_2	-352,06	-280,32	-280,06	-240,20	-239,73	-208,31	-172,13	-168,22	-168,19	-171,77	-135,93	-100,14	-100,21	-67,97	-67,97
bmsr_1_3	-352,79	-280,34	-280,79	-240,02	-240,57	-208,33	-172,15	-168,02	-168,11	-172,59	-135,93	-100,16	-100,14	-67,96	-67,97
bmsr_1_4	-352,36	-280,36	-280,36	-240,14	-240,14	-208,36	-172,17	-168,15	-168,15	-172,17	-135,94	-100,18	-100,18	-67,97	-67,97
bmsr_2_1	-352,80	-280,79	-280,36	-240,62	-239,98	-208,33	-172,58	-168,18	-168,08	-172,13	-135,90	-100,13	-100,21	-67,97	-67,96
bmsr_2_2	-352,51	-280,75	-280,03	-240,65	-239,62	-208,28	-172,56	-168,18	-168,04	-171,73	-135,94	-100,10	-100,17	-67,97	-67,96
<b>bmsr_2_3</b>	<b>-353,24</b>	<b>-280,76</b>	<b>-280,76</b>	<b>-240,47</b>	<b>-240,47</b>	<b>-208,30</b>	<b>-172,58</b>	<b>-167,99</b>	<b>-167,99</b>	<b>-172,58</b>	<b>-135,94</b>	<b>-100,12</b>	<b>-100,12</b>	<b>-67,96</b>	<b>-67,96</b>
bmsr_3_1	-352,09	-280,07	-280,35	-239,79	-240,20	-208,32	-171,75	-168,25	-168,28	-172,12	-135,94	-100,20	-100,20	-67,97	-67,97
bmsr_3_2	-351,81	-280,02	-280,02	-239,80	-239,80	-208,26	-171,70	-168,21	-168,20	-171,70	-135,96	-100,13	-100,12	-67,97	-67,97
bmsr_4_1	-352,43	-280,39	-280,39	-240,20	-240,20	-208,36	-172,13	-168,27	-168,27	-172,13	-135,94	-100,22	-100,22	-67,97	-67,97
bmss_1_1	-352,64	-280,70	-280,69	-239,95	-239,95	-208,74	-172,03	-167,96	-167,96	-172,03	-135,94	-100,04	-100,04	-67,97	-67,97
bmss_1_2	-353,19	-280,66	-281,22	-239,94	-240,42	-208,70	-172,02	-167,93	-167,96	-172,48	-135,93	-100,03	-100,03	-67,95	-67,97
bmss_1_3	-352,45	-280,66	-280,49	-240,11	-239,57	-208,70	-172,00	-168,12	-168,04	-171,65	-135,93	-100,01	-100,11	-67,97	-67,97
bmss_1_4	-352,68	-280,69	-280,75	-240,05	-239,89	-208,74	-171,99	-168,08	-168,01	-171,98	-135,91	-100,01	-100,09	-67,97	-67,97
<b>bmss_2_2</b>	<b>-353,69</b>	<b>-281,19</b>	<b>-281,19</b>	<b>-240,35</b>	<b>-240,35</b>	<b>-208,66</b>	<b>-172,47</b>	<b>-167,92</b>	<b>-167,92</b>	<b>-172,47</b>	<b>-135,89</b>	<b>-100,02</b>	<b>-100,02</b>	<b>-67,95</b>	<b>-67,95</b>
bmss_2_3	-352,96	-281,18	-280,45	-240,55	-239,53	-208,65	-172,46	-168,12	-168,02	-171,64	-135,90	-100,01	-100,11	-67,97	-67,95
bmss_2_4	-353,25	-281,22	-280,71	-240,55	-239,89	-208,70	-172,46	-168,07	-167,98	-171,97	-135,94	-100,00	-100,08	-67,97	-67,95
bmss_3_3	-352,29	-280,28	-280,28	-239,73	-239,73	-208,29	-171,52	-168,08	-168,08	-171,52	-135,95	-99,89	-99,89	-67,97	-67,97
bmss_3_4	-352,53	-280,47	-280,56	-239,69	-240,08	-208,53	-171,55	-168,06	-168,18	-171,87	-135,96	-99,95	-100,00	-67,97	-67,97
bmss_4_4	-352,75	-280,74	-280,74	-240,00	-240,00	-208,70	-171,91	-168,15	-168,15	-171,91	-135,91	-100,04	-100,04	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C68

Sub-struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 - AL1 AL2	AS1 AL1 - AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 - AL2	AS1 AS2 AL2 - AL1
bmsr_1_1	-16,06	-12,00	-12,03	-4,11	-3,96	-7,96	-4,02	-0,09	-0,01	-3,95	0,00	-8,09	-8,09	-4,06	-4,03
bmsr_1_2	-15,78	-12,01	-11,75	-4,12	-3,58	-7,97	-4,02	-0,11	-0,01	-3,58	0,01	-7,82	-8,17	-3,77	-4,03
bmsr_1_3	-16,57	-12,07	-12,53	-3,93	-4,50	-8,03	-4,02	0,09	-0,01	-4,50	0,00	-8,53	-8,05	-4,50	-4,03
bmsr_1_4	-16,07	-12,04	-12,04	-4,03	-4,03	-8,00	-4,02	0,00	-0,01	-4,02	0,00	-8,06	-8,03	-4,03	-4,03
bmsr_2_1	-16,53	-12,49	-12,05	-4,56	-3,84	-7,99	-4,50	-0,09	0,09	-3,95	0,02	-8,57	-8,08	-4,04	-4,48
bmsr_2_2	-16,31	-12,52	-11,79	-4,62	-3,52	-8,01	-4,50	-0,10	0,08	-3,59	0,00	-8,30	-8,22	-3,80	-4,52
<b>bmsr_2_3</b>	<b>-17,08</b>	<b>-12,56</b>	<b>-12,56</b>	<b>-4,43</b>	<b>-4,43</b>	<b>-8,06</b>	<b>-4,50</b>	<b>0,09</b>	<b>0,09</b>	<b>-4,50</b>	<b>-0,02</b>	<b>-9,00</b>	<b>-8,08</b>	<b>-4,52</b>	<b>-4,52</b>
bmsr_3_1	-15,75	-11,70	-11,98	-3,66	-4,06	-7,92	-3,58	-0,09	-0,11	-3,95	0,00	-7,83	-8,22	-4,06	-3,77
bmsr_3_2	-15,62	-11,80	-11,80	-3,73	-3,73	-8,01	-3,60	-0,11	-0,11	-3,60	-0,02	-7,59	-8,42	-3,82	-3,82
bmsr_4_1	-16,06	-11,99	-11,99	-4,05	-4,05	-7,93	-3,95	-0,09	-0,09	-3,95	-0,01	-8,12	-8,16	-4,07	-4,07
bmss_1_1	-16,64	-12,65	-12,65	-3,98	-3,98	-8,66	-4,02	0,04	0,04	-4,02	0,00	-7,97	-8,59	-3,98	-3,98
bmss_1_2	-17,22	-12,64	-13,22	-3,99	-4,47	-8,64	-4,02	0,05	0,04	-4,50	-0,01	-8,57	-8,70	-4,59	-4,00
bmss_1_3	-16,39	-12,57	-12,40	-4,16	-3,53	-8,57	-4,02	-0,14	0,04	-3,57	0,00	-7,82	-8,80	-3,82	-3,99
bmss_1_4	-16,65	-12,63	-12,69	-4,11	-3,86	-8,64	-4,02	-0,11	0,04	-3,93	0,02	-8,03	-8,71	-4,02	-3,97
<b>bmss_2_2</b>	<b>-17,75</b>	<b>-13,20</b>	<b>-13,20</b>	<b>-4,43</b>	<b>-4,43</b>	<b>-8,63</b>	<b>-4,50</b>	<b>0,05</b>	<b>0,05</b>	<b>-4,50</b>	<b>0,02</b>	<b>-9,14</b>	<b>-8,75</b>	<b>-4,55</b>	<b>-4,55</b>
bmss_2_3	-16,92	-13,12	-12,36	-4,62	-3,50	-8,54	-4,50	-0,14	0,04	-3,57	0,02	-8,40	-8,85	-3,80	-4,55
bmss_2_4	-17,25	-13,19	-12,66	-4,62	-3,89	-8,62	-4,50	-0,10	0,05	-3,93	-0,01	-8,61	-8,83	-4,06	-4,59
bmss_3_3	-16,58	-12,54	-12,54	-3,91	-3,91	-8,52	-3,67	-0,22	-0,22	-3,67	-0,02	-8,05	-9,24	-4,04	-4,04
bmss_3_4	-16,64	-12,54	-12,63	-3,80	-4,14	-8,57	-3,63	-0,14	-0,21	-3,91	-0,02	-8,04	-9,10	-4,09	-4,00
bmss_4_4	-16,74	-12,70	-12,70	-4,03	-4,03	-8,63	-3,91	-0,14	-0,14	-3,91	0,03	-8,14	-8,92	-4,04	-4,04

Fortsetzung Tabelle C68

Sub-struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bmsr_1_1	-11,37	-8,89	-8,91	-0,16	-0,07	-6,42	-1,64	2,29	2,30	-1,64	3,15	0,81	0,74	1,57	1,58
bmsr_1_2	-11,04	-8,84	-8,58	-0,15	0,32	-6,37	-1,62	2,29	2,32	-1,26	3,15	0,83	0,76	1,57	1,57
bmsr_1_3	-11,77	-8,86	-9,31	0,03	-0,52	-6,39	-1,64	2,49	2,40	-2,08	3,15	0,81	0,83	1,57	1,58
bmsr_1_4	-11,34	-8,88	-8,88	-0,09	-0,09	-6,42	-1,66	2,36	2,36	-1,66	3,14	0,79	0,79	1,57	1,57
bmsr_2_1	-11,78	-9,31	-8,88	-0,57	0,07	-6,39	-2,07	2,33	2,43	-1,62	3,18	0,84	0,76	1,58	1,57
bmsr_2_2	-11,49	-9,27	-8,55	-0,60	0,43	-6,34	-2,05	2,33	2,47	-1,22	3,14	0,87	0,80	1,58	1,57
<b>bmsr_2_3</b>	<b>-12,22</b>	<b>-9,28</b>	<b>-9,28</b>	<b>-0,42</b>	<b>-0,42</b>	<b>-6,36</b>	<b>-2,07</b>	<b>2,52</b>	<b>2,52</b>	<b>-2,07</b>	<b>3,14</b>	<b>0,85</b>	<b>0,85</b>	<b>1,58</b>	<b>1,58</b>
bmsr_3_1	-11,07	-8,59	-8,87	0,26	-0,15	-6,38	-1,24	2,26	2,23	-1,61	3,14	0,77	0,77	1,57	1,57
bmsr_3_2	-10,79	-8,54	-8,54	0,25	0,25	-6,32	-1,19	2,30	2,31	-1,19	3,12	0,84	0,85	1,57	1,57
bmsr_4_1	-11,41	-8,91	-8,91	-0,15	-0,15	-6,42	-1,62	2,24	2,24	-1,62	3,14	0,75	0,75	1,57	1,58
bmss_1_1	-11,62	-9,22	-9,21	0,10	0,10	-6,80	-1,52	2,55	2,55	-1,52	3,14	0,93	0,93	1,57	1,57
bmss_1_2	-12,18	-9,18	-9,74	0,11	-0,37	-6,76	-1,51	2,58	2,55	-1,97	3,15	0,94	0,94	1,57	1,59
bmss_1_3	-11,43	-9,18	-9,01	-0,06	0,48	-6,76	-1,49	2,39	2,47	-1,14	3,15	0,96	0,86	1,57	1,57
bmss_1_4	-11,66	-9,21	-9,27	0,00	0,16	-6,80	-1,48	2,43	2,50	-1,47	3,17	0,96	0,88	1,57	1,57
<b>bmss_2_2</b>	<b>-12,67</b>	<b>-9,71</b>	<b>-9,71</b>	<b>-0,30</b>	<b>-0,30</b>	<b>-6,72</b>	<b>-1,96</b>	<b>2,59</b>	<b>2,59</b>	<b>-1,96</b>	<b>3,19</b>	<b>0,95</b>	<b>0,95</b>	<b>1,59</b>	<b>1,59</b>
bmss_2_3	-11,94	-9,70	-8,97	-0,50	0,52	-6,71	-1,95	2,39	2,49	-1,13	3,18	0,96	0,86	1,59	1,57
bmss_2_4	-12,23	-9,74	-9,23	-0,50	0,16	-6,76	-1,95	2,44	2,53	-1,46	3,14	0,97	0,89	1,59	1,57
bmss_3_3	-11,27	-8,80	-8,80	0,32	0,32	-6,35	-1,01	2,43	2,43	-1,01	3,13	1,08	1,08	1,57	1,57
bmss_3_4	-11,51	-8,99	-9,08	0,36	-0,03	-6,59	-1,04	2,45	2,33	-1,36	3,12	1,02	0,97	1,57	1,57
bmss_4_4	-11,73	-9,26	-9,26	0,05	0,05	-6,76	-1,40	2,36	2,36	-1,40	3,17	0,93	0,93	1,57	1,57

Abbildung C69 :

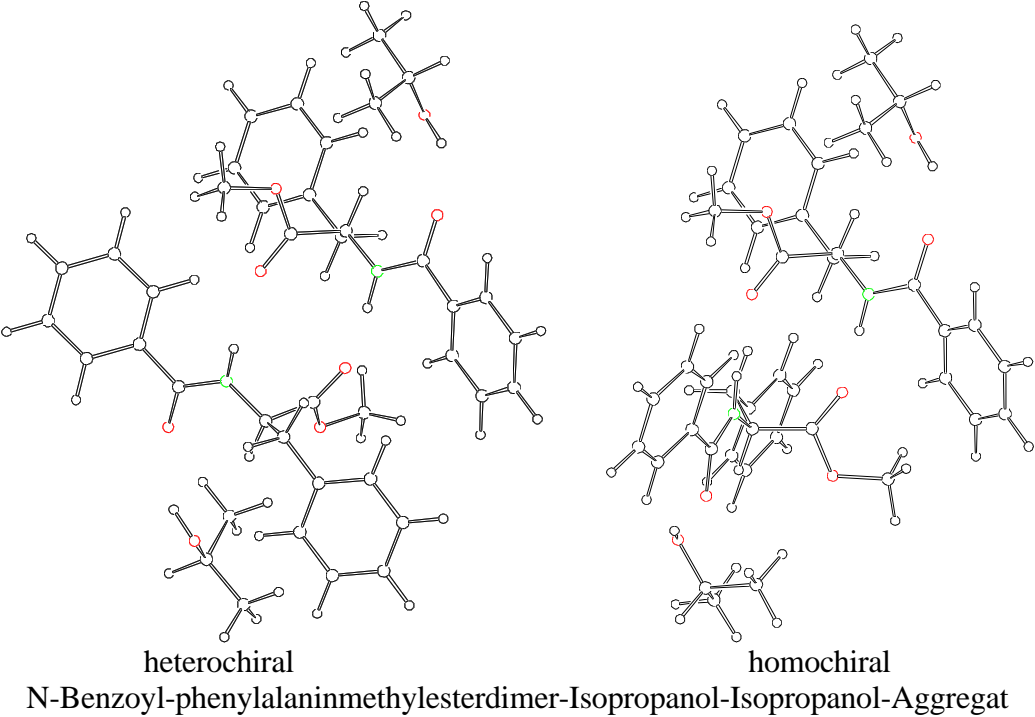


Tabelle C69 : Energien des N-Benzoyl-phenylalaninmethylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1	AS1	AS1	AS2	AS1	AS1	AS1	AS2	AS2	AS2	AL1	AS1	AS2	AL1
		AS2	AS2	AL1	AL1	AS2	AL1	AL2	AL1	AL2	AL2	AL2	AL2	AL2	AL2
bpsr_1_1	-296,74	-224,81	-224,74	-212,17	-212,14	-152,81	-144,19	-140,19	-140,23	-144,15	-135,93	-72,21	-72,24	-67,96	-67,97
bpsr_1_2	-297,53	-225,54	-224,66	-212,60	-212,23	-152,67	-144,65	-139,98	-140,25	-144,13	-135,94	-72,02	-72,15	-67,97	-67,97
bpsr_1_3	-298,14	-226,16	-224,55	-213,32	-212,15	-152,57	-145,37	-139,81	-140,15	-144,21	-135,94	-71,87	-72,22	-67,97	-67,96
bpsr_1_4	-296,79	-224,81	-224,79	-212,14	-212,24	-152,80	-144,20	-140,16	-140,25	-144,25	-135,94	-72,22	-72,25	-67,97	-67,97
bpsr_1_4	-296,79	-224,81	-224,79	-212,14	-212,24	-152,80	-144,20	-140,16	-140,25	-144,25	-135,94	-72,22	-72,25	-67,97	-67,97
bpsr_2_1	-298,08	-226,16	-224,50	-213,34	-212,04	-152,56	-145,36	-139,85	-140,13	-144,10	-135,91	-71,86	-72,20	-67,96	-67,96
<b>bpsr_2_2</b>	<b>-298,87</b>	<b>-226,06</b>	<b>-225,26</b>	<b>-213,42</b>	<b>-212,76</b>	<b>-152,48</b>	<b>-145,35</b>	<b>-139,90</b>	<b>-140,18</b>	<b>-144,81</b>	<b>-135,94</b>	<b>-71,85</b>	<b>-72,25</b>	<b>-67,97</b>	<b>-67,96</b>
bpsr_3_1	-297,47	-224,67	-225,51	-212,16	-212,87	-152,70	-144,12	-140,29	-140,30	-144,85	-135,93	-72,24	-72,27	-67,97	-67,97
bpsr_3_2	-298,28	-225,44	-225,38	-212,71	-212,94	-152,59	-144,63	-140,07	-140,35	-144,82	-135,96	-72,01	-72,25	-67,97	-67,97
bpsr_4_1	-296,70	-224,77	-224,73	-212,12	-212,16	-152,80	-144,13	-140,23	-140,25	-144,13	-135,93	-72,25	-72,22	-67,96	-67,97
bpss_1_1	-296,92	-224,93	-224,93	-212,13	-212,13	-152,94	-144,19	-140,15	-140,12	-144,15	-135,95	-72,20	-72,15	-67,97	-67,97
bpss_1_2	-298,53	-224,84	-226,48	-212,15	-213,27	-152,81	-144,16	-140,12	-139,69	-145,29	-135,96	-72,14	-71,73	-67,98	-67,96
bpss_1_3	-297,77	-224,85	-225,79	-212,17	-212,70	-152,86	-144,14	-140,18	-139,98	-144,73	-135,93	-72,16	-72,01	-67,96	-67,97
bpss_1_4	-297,44	-225,50	-225,48	-212,13	-212,01	-153,52	-144,11	-140,16	-140,14	-144,06	-135,93	-72,13	-72,17	-67,97	-67,97
<b>bpss_2_2</b>	<b>-299,86</b>	<b>-226,22</b>	<b>-226,27</b>	<b>-213,30</b>	<b>-213,10</b>	<b>-152,59</b>	<b>-145,34</b>	<b>-139,80</b>	<b>-139,57</b>	<b>-145,18</b>	<b>-135,93</b>	<b>-71,81</b>	<b>-71,63</b>	<b>-67,98</b>	<b>-67,96</b>
bpss_3_2	-299,71	-226,11	-226,85	-212,57	-213,39	-153,21	-144,65	-139,94	-139,88	-145,36	-135,90	-71,99	-71,83	-67,96	-67,96
bpss_2_4	-298,93	-226,95	-225,29	-213,41	-212,01	-153,32	-145,36	-139,86	-140,10	-144,06	-135,95	-71,83	-72,16	-67,97	-67,96
bpss_3_3	-299,06	-226,20	-226,20	-212,68	-212,68	-153,31	-144,64	-140,03	-140,03	-144,64	-135,91	-71,98	-71,98	-67,96	-67,96
bpss_3_4	-298,28	-226,30	-225,38	-212,70	-212,10	-153,42	-144,64	-140,01	-140,20	-144,05	-135,94	-71,98	-72,16	-67,97	-67,96
bpss_4_4	-297,42	-225,48	-225,48	-212,06	-212,06	-153,52	-144,05	-140,20	-140,20	-144,05	-135,92	-72,17	-72,17	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C69

Sub- struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2
bpsr_1_1	-16,36	-12,39	-12,33	-4,03	-3,97	-8,36	-4,01	-0,02	-0,02	-3,95	0,00	-8,00	-8,40	-3,97	-4,03
bpsr_1_2	-17,41	-13,40	-12,52	-4,64	-4,14	-8,50	-4,65	0,02	-0,13	-4,01	0,00	-8,91	-8,75	-4,01	-4,89
bpsr_1_3	-18,13	-14,11	-12,49	-5,53	-4,00	-8,48	-5,54	0,03	0,03	-4,02	-0,01	-9,63	-8,57	-4,02	-5,64
bpsr_1_4	-16,38	-12,37	-12,35	-3,98	-4,04	-8,33	-4,01	0,02	-0,02	-4,02	0,00	-8,05	-8,35	-4,01	-4,03
bpsr_1_4	-16,38	-12,37	-12,35	-3,98	-4,04	-8,33	-4,01	0,02	-0,02	-4,02	0,00	-8,05	-8,35	-4,01	-4,03
bpsr_2_1	-18,10	-14,14	-12,48	-5,56	-3,92	-8,51	-5,54	-0,03	0,03	-3,95	0,00	-9,60	-8,61	-3,96	-5,62
<b>bpsr_2_2</b>	<b>-18,84</b>	<b>-13,99</b>	<b>-13,19</b>	<b>-5,64</b>	<b>-4,58</b>	<b>-8,38</b>	<b>-5,53</b>	<b>-0,08</b>	<b>0,03</b>	<b>-4,59</b>	<b>-0,01</b>	<b>-10,46</b>	<b>-8,71</b>	<b>-4,85</b>	<b>-5,65</b>
bpsr_3_1	-17,03	-12,20	-13,04	-3,99	-4,67	-8,19	-3,92	-0,08	-0,07	-4,62	0,01	-8,84	-8,49	-4,83	-3,99
bpsr_3_2	-18,07	-13,20	-13,15	-4,75	-4,75	-8,33	-4,64	-0,08	-0,12	-4,59	-0,02	-9,73	-8,83	-4,87	-4,92
bpsr_4_1	-16,31	-12,34	-12,31	-3,95	-4,02	-8,33	-3,92	-0,02	-0,06	-3,95	-0,01	-7,97	-8,44	-3,98	-4,00
bpss_1_1	-16,63	-12,61	-12,61	-3,99	-4,04	-8,59	-4,01	0,03	0,00	-4,03	-0,01	-8,04	-8,59	-4,03	-4,02
bpss_1_2	-18,72	-13,01	-14,63	-4,06	-5,60	-8,94	-4,05	0,00	-0,01	-5,58	-0,01	-9,76	-9,09	-5,71	-4,08
bpss_1_3	-17,68	-12,71	-13,66	-4,07	-4,77	-8,69	-4,00	-0,07	0,00	-4,77	0,00	-8,98	-8,90	-4,97	-4,01
bpss_1_4	-17,20	-13,23	-13,22	-4,05	-3,91	-9,22	-4,00	-0,06	0,00	-3,92	0,01	-7,99	-9,28	-3,98	-3,99
<b>bpss_2_2</b>	<b>-20,47</b>	<b>-14,82</b>	<b>-14,85</b>	<b>-5,54</b>	<b>-5,53</b>	<b>-9,14</b>	<b>-5,56</b>	<b>0,00</b>	<b>0,02</b>	<b>-5,57</b>	<b>0,02</b>	<b>-11,35</b>	<b>-9,34</b>	<b>-5,66</b>	<b>-5,63</b>
bpss_3_2	-19,97	-14,33	-15,07	-4,66	-5,64	-9,40	-4,71	0,02	-0,09	-5,57	0,02	-10,59	-9,69	-5,64	-4,90
bpss_2_4	-19,01	-14,99	-13,33	-5,65	-3,92	-9,33	-5,57	-0,06	0,02	-3,93	-0,02	-9,66	-9,52	-4,02	-5,68
bpss_3_3	-19,18	-14,28	-14,28	-4,78	-4,78	-9,35	-4,70	-0,09	-0,09	-4,70	0,01	-9,84	-9,78	-4,91	-4,91
bpss_3_4	-18,22	-14,20	-13,27	-4,79	-4,02	-9,28	-4,71	-0,06	-0,08	-3,92	-0,02	-8,92	-9,59	-4,01	-4,94
bpss_4_4	-17,15	-13,18	-13,18	-3,96	-3,96	-9,19	-3,92	-0,06	-0,06	-3,92	0,02	-7,98	-9,31	-3,97	-3,97

Fortsetzung Tabelle C69

Sub- struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bpsr_1_1	-10,58	-8,19	-8,12	0,45	0,48	-5,73	-1,11	2,89	2,85	-1,07	3,15	1,33	1,30	1,57	1,58
bpsr_1_2	-11,37	-8,92	-8,04	0,02	0,39	-5,59	-1,57	3,10	2,83	-1,05	3,14	1,52	1,39	1,57	1,57
bpsr_1_3	-11,98	-9,54	-7,93	-0,70	0,47	-5,49	-2,29	3,27	2,93	-1,13	3,14	1,67	1,32	1,58	1,57
bpsr_1_4	-10,63	-8,19	-8,17	0,48	0,38	-5,72	-1,12	2,92	2,83	-1,17	3,14	1,32	1,29	1,57	1,57
bpsr_1_4	-10,63	-8,19	-8,17	0,48	0,38	-5,72	-1,12	2,92	2,83	-1,17	3,14	1,32	1,29	1,57	1,57
bpsr_2_1	-11,92	-9,54	-7,88	-0,72	0,58	-5,48	-2,28	3,23	2,95	-1,02	3,17	1,68	1,34	1,58	1,58
<b>bpsr_2_2</b>	<b>-12,71</b>	<b>-9,44</b>	<b>-8,64</b>	<b>-0,80</b>	<b>-0,14</b>	<b>-5,40</b>	<b>-2,27</b>	<b>3,18</b>	<b>2,90</b>	<b>-1,73</b>	<b>3,14</b>	<b>1,69</b>	<b>1,29</b>	<b>1,58</b>	<b>1,57</b>
bpsr_3_1	-11,31	-8,05	-8,89	0,46	-0,25	-5,62	-1,04	2,79	2,78	-1,77	3,15	1,30	1,27	1,57	1,57
bpsr_3_2	-12,12	-8,82	-8,76	-0,09	-0,32	-5,51	-1,55	3,01	2,73	-1,74	3,12	1,53	1,29	1,57	1,57
bpsr_4_1	-10,54	-8,15	-8,11	0,50	0,46	-5,72	-1,05	2,85	2,83	-1,05	3,15	1,29	1,32	1,57	1,58
bpss_1_1	-10,76	-8,31	-8,31	0,49	0,49	-5,86	-1,11	2,93	2,96	-1,07	3,13	1,34	1,39	1,57	1,57
bpss_1_2	-12,37	-8,22	-9,86	0,47	-0,65	-5,73	-1,08	2,96	3,39	-2,21	3,12	1,40	1,81	1,58	1,56
bpss_1_3	-11,61	-8,23	-9,17	0,45	-0,08	-5,78	-1,06	2,90	3,10	-1,65	3,15	1,38	1,53	1,57	1,58
bpss_1_4	-11,28	-8,88	-8,86	0,49	0,61	-6,44	-1,03	2,92	2,94	-0,98	3,15	1,41	1,37	1,57	1,57
<b>bpss_2_2</b>	<b>-13,70</b>	<b>-9,60</b>	<b>-9,65</b>	<b>-0,68</b>	<b>-0,48</b>	<b>-5,51</b>	<b>-2,26</b>	<b>3,28</b>	<b>3,51</b>	<b>-2,10</b>	<b>3,15</b>	<b>1,73</b>	<b>1,91</b>	<b>1,58</b>	<b>1,56</b>
bpss_3_2	-13,55	-9,49	-10,23	0,05	-0,77	-6,13	-1,57	3,14	3,20	-2,28	3,18	1,55	1,71	1,58	1,58
bpss_2_4	-12,77	-10,33	-8,67	-0,79	0,61	-6,24	-2,28	3,22	2,98	-0,98	3,13	1,71	1,38	1,58	1,57
bpss_3_3	-12,90	-9,58	-9,58	-0,06	-0,06	-6,23	-1,56	3,05	3,05	-1,56	3,17	1,56	1,56	1,58	1,58
bpss_3_4	-12,12	-9,68	-8,76	-0,08	0,52	-6,34	-1,56	3,07	2,88	-0,97	3,14	1,56	1,38	1,58	1,57
bpss_4_4	-11,26	-8,86	-8,86	0,56	0,56	-6,44	-0,97	2,88	2,88	-0,97	3,16	1,37	1,37	1,57	1,57

Abbildung C70 :

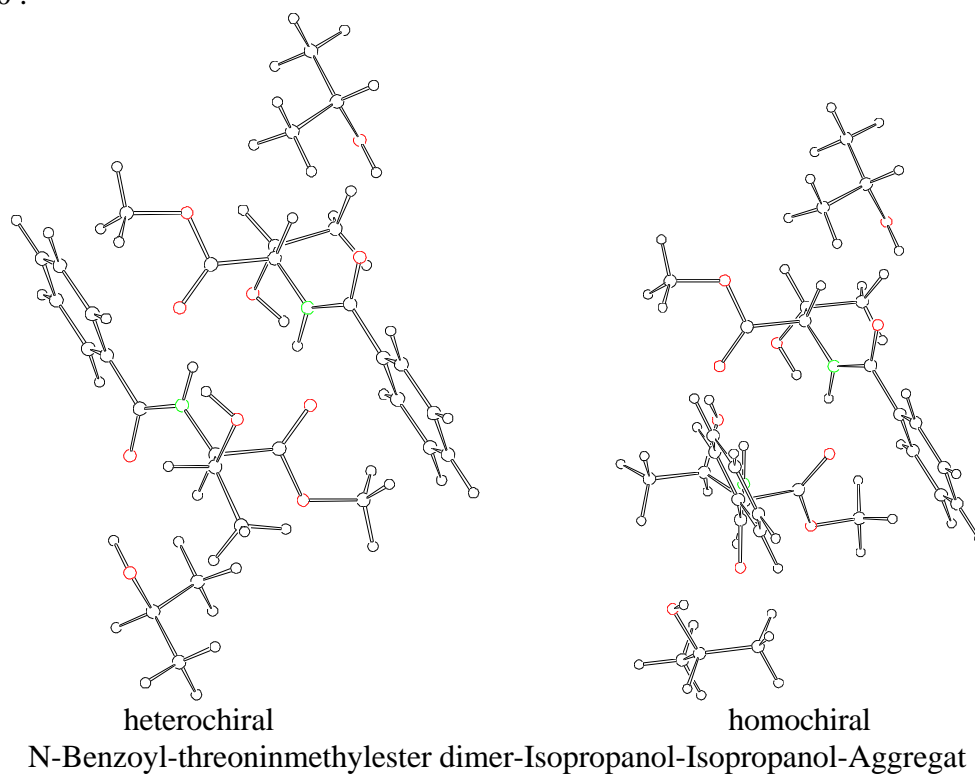


Tabelle C70 : Energien des N-Benzoyl-threoninemethylester dimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2	AS1 AL2	AS1 AL1	AS2 AL1	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
btsr_1_1	-458,44	-386,55	-386,54	-289,78	-289,72	-314,64	-221,77	-217,86	-217,90	-221,76	-135,93	-149,85	-149,94	-67,96	-67,97
btsr_1_2	-459,28	-386,51	-387,36	-289,76	-290,58	-314,60	-221,78	-217,84	-217,85	-222,60	-136,00	-149,88	-149,89	-68,03	-67,97
btsr_1_3	-459,92	-386,50	-388,01	-289,66	-291,21	-314,60	-221,79	-217,75	-217,80	-223,25	-135,92	-149,88	-149,84	-67,95	-67,97
btsr_1_4	-458,44	-386,54	-386,54	-289,74	-289,74	-314,64	-221,78	-217,83	-217,83	-221,78	-135,94	-149,87	-149,87	-67,97	-67,97
btsr_2_1	-459,91	-388,02	-386,50	-291,23	-289,63	-314,59	-223,23	-217,84	-217,82	-221,77	-135,89	-149,82	-149,95	-67,96	-67,95
btsr_2_2	-460,76	-387,33	-387,97	-290,45	-291,36	-314,56	-222,55	-217,84	-217,95	-223,26	-135,94	-149,97	-149,86	-67,95	-67,98
<b>btsr_2_3</b>	<b>-461,41</b>	<b>-387,97</b>	<b>-387,97</b>	<b>-291,15</b>	<b>-291,15</b>	<b>-314,57</b>	<b>-223,26</b>	<b>-217,73</b>	<b>-217,73</b>	<b>-223,25</b>	<b>-135,93</b>	<b>-149,86</b>	<b>-149,86</b>	<b>-67,95</b>	<b>-67,95</b>
btsr_3_1	-459,27	-387,37	-386,49	-290,53	-289,85	-314,59	-222,52	-217,95	-218,04	-221,76	-135,93	-149,93	-149,95	-67,96	-67,98
btsr_3_2	-460,11	-387,33	-387,31	-290,53	-290,72	-314,56	-222,55	-217,93	-218,00	-222,62	-136,01	-149,97	-149,91	-68,03	-67,98
btsr_4_1	-458,45	-386,54	-386,54	-289,76	-289,77	-314,65	-221,74	-217,93	-217,93	-221,74	-135,94	-149,92	-149,92	-67,96	-67,96
btss_1_1	-457,11	-385,25	-385,25	-288,95	-288,94	-313,38	-221,06	-217,01	-217,00	-221,06	-135,94	-149,12	-149,12	-67,97	-67,97
btss_1_2	-458,41	-385,19	-386,51	-288,59	-290,56	-313,29	-220,82	-216,63	-217,21	-222,64	-135,92	-148,87	-149,31	-67,94	-67,97
btss_1_3	-457,75	-385,17	-385,84	-288,76	-289,87	-313,28	-220,77	-216,80	-217,37	-221,96	-135,94	-148,83	-149,46	-67,96	-67,97
btss_1_4	-457,21	-385,26	-385,37	-289,16	-288,84	-313,39	-221,03	-217,26	-217,08	-220,99	-135,90	-149,10	-149,18	-67,97	-67,97
<b>btss_2_2</b>	<b>-459,54</b>	<b>-386,41</b>	<b>-386,41</b>	<b>-290,20</b>	<b>-290,20</b>	<b>-313,26</b>	<b>-222,48</b>	<b>-216,91</b>	<b>-216,92</b>	<b>-222,48</b>	<b>-135,86</b>	<b>-149,17</b>	<b>-149,18</b>	<b>-67,94</b>	<b>-67,94</b>
btss_2_3	-458,87	-386,41	-385,75	-290,38	-289,49	-313,25	-222,46	-217,11	-217,06	-221,78	-135,87	-149,16	-149,31	-67,96	-67,94
btss_2_4	-458,55	-386,51	-385,30	-290,84	-288,50	-313,30	-222,65	-217,48	-216,67	-220,72	-135,93	-149,32	-148,92	-67,97	-67,94
btss_3_3	-458,21	-385,74	-385,74	-289,68	-289,69	-313,24	-221,77	-217,24	-217,24	-221,77	-135,90	-149,30	-149,30	-67,96	-67,96
btss_3_4	-457,90	-385,84	-385,29	-290,17	-288,68	-313,28	-221,96	-217,63	-216,84	-220,67	-135,96	-149,46	-148,87	-67,97	-67,96
btss_4_4	-457,35	-385,37	-385,37	-289,10	-289,10	-313,37	-220,95	-217,34	-217,34	-220,94	-135,91	-149,16	-149,15	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C70

Sub- struktur	W <sub>A</sub> / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL2 AL1
btsr_1_1	-22,72	-18,79	-18,78	-4,00	-3,85	-14,85	-3,95	-0,05	0,01	-3,86	0,00	-7,87	-14,91	-3,93	-3,93
btsr_1_2	-23,52	-18,77	-19,56	-3,88	-4,69	-14,83	-3,94	0,06	0,00	-4,69	-0,01	-8,68	-14,89	-4,74	-3,95
btsr_1_3	-24,28	-18,82	-20,34	-3,87	-5,46	-14,87	-3,94	0,08	0,00	-5,46	-0,01	-9,40	-14,89	-5,47	-3,95
btsr_1_4	-22,76	-18,83	-18,83	-3,93	-3,93	-14,89	-3,94	0,01	0,01	-3,94	0,00	-7,86	-14,87	-3,93	-3,93
btsr_2_1	-24,22	-20,30	-18,77	-5,50	-3,76	-14,83	-5,46	-0,06	0,07	-3,86	0,02	-9,42	-14,91	-3,93	-5,45
btsr_2_2	-25,01	-19,53	-20,19	-4,55	-5,57	-14,73	-4,61	0,07	-0,11	-5,44	-0,01	-10,27	-14,95	-5,48	-4,82
<b>btsr_2_3</b>	<b>-25,78</b>	<b>-20,30</b>	<b>-20,30</b>	<b>-5,39</b>	<b>-5,39</b>	<b>-14,85</b>	<b>-5,44</b>	<b>0,08</b>	<b>0,08</b>	<b>-5,44</b>	<b>-0,02</b>	<b>-10,91</b>	<b>-14,90</b>	<b>-5,48</b>	<b>-5,48</b>
btsr_3_1	-23,45	-19,52	-18,65	-4,66	-3,96	-14,71	-4,62	-0,06	-0,12	-3,85	0,01	-8,75	-14,98	-3,93	-4,80
btsr_3_2	-24,23	-19,48	-19,41	-4,56	-4,81	-14,69	-4,61	0,06	-0,11	-4,68	-0,01	-9,53	-14,93	-4,75	-4,82
btsr_4_1	-22,68	-18,74	-18,74	-3,92	-3,92	-14,81	-3,86	-0,05	-0,05	-3,86	-0,01	-7,86	-14,96	-3,94	-3,94
btss_1_1	-22,94	-19,05	-19,05	-3,89	-3,89	-15,15	-3,97	0,08	0,08	-3,97	-0,01	-7,79	-15,00	-3,89	-3,89
btss_1_2	-24,32	-19,03	-20,39	-3,81	-5,34	-15,11	-3,98	0,18	0,07	-5,40	-0,02	-9,20	-14,95	-5,29	-3,94
btss_1_3	-23,53	-18,91	-19,59	-4,00	-4,48	-14,99	-3,98	-0,01	0,06	-4,54	-0,01	-8,54	-15,01	-4,61	-3,93
btss_1_4	-22,99	-19,01	-19,12	-4,12	-3,72	-15,11	-3,96	-0,19	0,07	-3,83	0,04	-7,92	-15,19	-3,98	-3,87
<b>btss_2_2</b>	<b>-25,32</b>	<b>-20,13</b>	<b>-20,13</b>	<b>-5,15</b>	<b>-5,15</b>	<b>-14,91</b>	<b>-5,37</b>	<b>0,20</b>	<b>0,20</b>	<b>-5,37</b>	<b>0,01</b>	<b>-10,42</b>	<b>-14,58</b>	<b>-5,19</b>	<b>-5,19</b>
btss_2_3	-24,50	-19,99	-19,31	-5,32	-4,28	-14,78	-5,36	0,02	0,19	-4,51	0,03	-9,75	-14,62	-4,50	-5,18
btss_2_4	-24,40	-20,33	-19,10	-5,62	-3,68	-15,06	-5,39	-0,20	0,18	-3,84	-0,02	-9,32	-15,18	-4,07	-5,30
btss_3_3	-23,69	-19,18	-19,18	-4,47	-4,47	-14,65	-4,51	0,02	0,02	-4,51	0,02	-9,06	-14,67	-4,51	-4,51
btss_3_4	-23,64	-19,55	-18,99	-4,78	-3,88	-14,95	-4,54	-0,20	-0,01	-3,84	-0,03	-8,66	-15,26	-4,09	-4,65
btss_4_4	-23,09	-19,09	-19,09	-4,00	-4,00	-15,06	-3,82	-0,21	-0,21	-3,82	0,04	-8,07	-15,46	-4,00	-4,00

Fortsetzung Tabelle C70

Sub- struktur	W <sub>M</sub> / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
btsr_1_1	-13,98	-11,63	-11,62	1,99	2,05	-9,26	0,46	4,37	4,33	0,47	3,15	2,84	2,75	1,57	1,58
btsr_1_2	-14,82	-11,59	-12,44	2,01	1,19	-9,22	0,45	4,39	4,38	-0,37	3,08	2,81	2,80	1,57	1,51
btsr_1_3	-15,46	-11,58	-13,09	2,11	0,56	-9,22	0,44	4,48	4,43	-1,02	3,16	2,81	2,85	1,57	1,59
btsr_1_4	-13,98	-11,62	-11,62	2,03	2,03	-9,26	0,45	4,40	4,40	0,45	3,14	2,82	2,82	1,57	1,57
btsr_2_1	-15,45	-13,10	-11,58	0,54	2,14	-9,21	-1,00	4,39	4,41	0,46	3,19	2,87	2,74	1,59	1,58
btsr_2_2	-16,30	-12,41	-13,05	1,32	0,41	-9,18	-0,32	4,39	4,28	-1,03	3,14	2,72	2,83	1,56	1,59
<b>btsr_2_3</b>	<b>-16,95</b>	<b>-13,05</b>	<b>-13,05</b>	<b>0,62</b>	<b>0,62</b>	<b>-9,19</b>	<b>-1,03</b>	<b>4,50</b>	<b>4,50</b>	<b>-1,02</b>	<b>3,15</b>	<b>2,83</b>	<b>2,83</b>	<b>1,59</b>	<b>1,59</b>
btsr_3_1	-14,81	-12,45	-11,57	1,24	1,92	-9,21	-0,29	4,28	4,19	0,47	3,15	2,76	2,74	1,56	1,58
btsr_3_2	-15,65	-12,41	-12,39	1,24	1,05	-9,18	-0,32	4,30	4,23	-0,39	3,07	2,72	2,78	1,56	1,51
btsr_4_1	-13,99	-11,62	-11,62	2,01	2,00	-9,27	0,49	4,30	4,30	0,49	3,14	2,77	2,77	1,58	1,58
btss_1_1	-12,65	-10,33	-10,33	2,82	2,83	-8,00	1,17	5,22	5,23	1,17	3,14	3,57	3,57	1,57	1,57
btss_1_2	-13,95	-10,27	-11,59	3,18	1,21	-7,91	1,41	5,60	5,02	-0,41	3,16	3,82	3,38	1,57	1,60
btss_1_3	-13,29	-10,25	-10,92	3,01	1,90	-7,90	1,46	5,43	4,86	0,27	3,14	3,86	3,23	1,57	1,58
btss_1_4	-12,75	-10,34	-10,45	2,61	2,93	-8,01	1,20	4,97	5,15	1,24	3,18	3,59	3,51	1,57	1,57
<b>btss_2_2</b>	<b>-15,08</b>	<b>-11,49</b>	<b>-11,49</b>	<b>1,57</b>	<b>1,57</b>	<b>-7,88</b>	<b>-0,25</b>	<b>5,32</b>	<b>5,31</b>	<b>-0,25</b>	<b>3,22</b>	<b>3,52</b>	<b>3,51</b>	<b>1,60</b>	<b>1,60</b>
btss_2_3	-14,41	-11,49	-10,83	1,39	2,28	-7,87	-0,23	5,12	5,17	0,45	3,21	3,53	3,38	1,60	1,58
btss_2_4	-14,09	-11,59	-10,38	0,93	3,27	-7,92	-0,42	4,75	5,56	1,51	3,15	3,37	3,77	1,60	1,57
btss_3_3	-13,75	-10,82	-10,82	2,09	2,08	-7,86	0,46	4,99	4,99	0,46	3,18	3,39	3,39	1,58	1,58
btss_3_4	-13,44	-10,92	-10,37	1,60	3,09	-7,90	0,27	4,60	5,39	1,56	3,12	3,23	3,82	1,58	1,57
btss_4_4	-12,89	-10,45	-10,45	2,67	2,67	-7,99	1,28	4,89	4,89	1,29	3,17	3,53	3,54	1,57	1,57



Abbildung C71 :

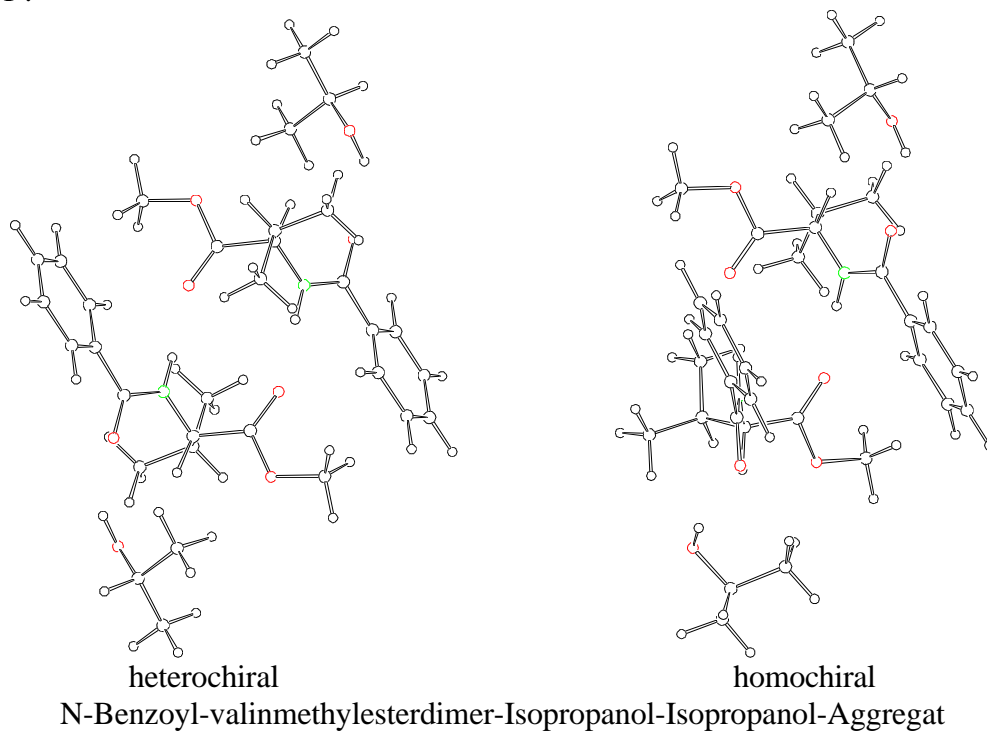


Tabelle C71 : Energien des N-Benzoyl-valinmethylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

Sub- struktur	H / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bvsr_1_1	-373,82	-301,81	-301,79	-250,89	-251,01	-229,78	-182,92	-178,97	-179,01	-182,96	-135,93	-111,01	-110,96	-67,96	-67,96
bvsr_1_2	-374,81	-301,79	-302,80	-250,79	-252,04	-229,75	-182,92	-178,89	-179,00	-184,01	-135,91	-111,00	-110,94	-67,97	-67,96
bvsr_1_3	-374,41	-302,40	-301,76	-251,59	-250,71	-229,73	-183,56	-178,94	-178,81	-182,93	-135,80	-110,89	-111,01	-67,96	-67,86
bvsr_1_4	-373,86	-301,81	-301,81	-250,98	-250,98	-229,78	-182,91	-179,05	-179,05	-182,91	-135,94	-111,00	-111,00	-67,96	-67,96
bvsr_2_1	-374,40	-302,39	-301,75	-251,53	-250,76	-229,73	-183,57	-178,86	-178,76	-182,96	-135,82	-110,89	-110,96	-67,96	-67,86
bvsr_2_2	-375,44	-302,37	-302,75	-251,48	-251,85	-229,70	-183,56	-178,78	-178,76	-184,02	-135,86	-110,89	-110,95	-67,97	-67,86
bvsr_2_3	-374,86	-302,36	-302,17	-251,60	-251,20	-229,69	-183,56	-178,91	-178,80	-183,37	-135,86	-110,88	-110,99	-67,98	-67,86
bvsr_3_1	-374,84	-301,80	-302,79	-250,92	-252,00	-229,74	-183,03	-178,91	-178,93	-184,02	-135,93	-111,02	-110,94	-67,97	-67,96
<b>bvsr_3_2</b>	<b>-375,84</b>	<b>-302,77</b>	<b>-302,77</b>	<b>-251,93</b>	<b>-251,93</b>	<b>-229,72</b>	<b>-184,02</b>	<b>-178,84</b>	<b>-178,84</b>	<b>-184,02</b>	<b>-135,97</b>	<b>-110,95</b>	<b>-110,95</b>	<b>-67,97</b>	<b>-67,97</b>
bvsr_4_1	-373,84	-301,83	-301,79	-251,00	-250,95	-229,78	-183,04	-178,99	-178,95	-182,96	-135,93	-111,02	-110,96	-67,96	-67,96
bvss_1_1	-373,71	-301,74	-301,74	-250,74	-250,74	-229,76	-182,80	-178,75	-178,75	-182,79	-135,95	-110,81	-110,81	-67,97	-67,97
bvss_1_2	-374,81	-301,71	-302,83	-250,70	-251,84	-229,74	-182,77	-178,71	-178,79	-183,90	-135,94	-110,79	-110,86	-67,96	-67,97
bvss_1_3	-374,21	-301,70	-302,24	-250,82	-251,21	-229,73	-182,76	-178,84	-178,87	-183,27	-135,94	-110,78	-110,93	-67,98	-67,97
bvss_1_4	-373,70	-301,74	-301,77	-250,83	-250,66	-229,78	-182,80	-178,89	-178,80	-182,76	-135,91	-110,83	-110,86	-67,97	-67,97
<b>bvss_2_2</b>	<b>-375,87</b>	<b>-302,80</b>	<b>-302,80</b>	<b>-251,78</b>	<b>-251,78</b>	<b>-229,71</b>	<b>-183,88</b>	<b>-178,75</b>	<b>-178,75</b>	<b>-183,88</b>	<b>-135,91</b>	<b>-110,84</b>	<b>-110,84</b>	<b>-67,96</b>	<b>-67,96</b>
bvss_2_3	-375,27	-302,80	-302,21	-251,91	-251,14	-229,71	-183,88	-178,89	-178,83	-183,25	-135,92	-110,83	-110,91	-67,98	-67,96
bvss_2_4	-374,87	-302,83	-301,75	-252,05	-250,68	-229,74	-183,94	-178,97	-178,76	-182,74	-135,96	-110,89	-110,84	-67,97	-67,96
bvss_3_3	-374,69	-302,20	-302,20	-251,29	-251,29	-229,70	-183,25	-178,96	-178,96	-183,25	-135,95	-110,91	-110,90	-67,98	-67,98
bvss_3_4	-374,29	-302,23	-301,74	-251,43	-250,81	-229,73	-183,30	-179,05	-178,89	-182,72	-135,98	-110,96	-110,83	-67,97	-67,98
bvss_4_4	-373,77	-301,78	-301,78	-250,74	-250,74	-229,75	-182,65	-178,93	-178,93	-182,65	-135,89	-110,79	-110,79	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C71

Sub- struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2
bvsr_1_1	-15,94	-11,89	-11,87	-3,96	-4,13	-7,82	-3,96	0,00	-0,09	-4,04	0,00	-8,12	-7,94	-4,05	-4,07
bvsr_1_2	-16,94	-11,88	-12,89	-3,86	-5,17	-7,81	-3,96	0,08	-0,09	-5,10	0,02	-9,15	-7,88	-5,05	-4,05
bvsr_1_3	-16,69	-12,64	-11,91	-4,88	-3,87	-7,84	-4,81	-0,09	0,06	-3,96	0,02	-8,87	-7,92	-4,05	-4,78
bvsr_1_4	-15,94	-11,85	-11,86	-4,06	-4,06	-7,79	-3,95	-0,09	-0,09	-3,95	-0,01	-8,14	-8,03	-4,08	-4,08
bvsr_2_1	-16,72	-12,68	-11,92	-4,81	-3,97	-7,87	-4,81	0,00	0,06	-4,03	0,00	-8,85	-7,87	-4,04	-4,80
bvsr_2_2	-17,76	-12,66	-12,93	-4,76	-5,06	-7,86	-4,81	0,08	0,06	-5,10	-0,02	-9,89	-7,85	-5,10	-4,83
bvsr_2_3	-17,14	-12,62	-12,31	-4,87	-4,36	-7,82	-4,81	-0,04	0,06	-4,40	-0,01	-9,31	-7,93	-4,52	-4,83
bvsr_3_1	-16,94	-11,88	-12,86	-3,97	-5,12	-7,78	-4,05	0,08	-0,03	-5,10	0,01	-9,17	-7,79	-5,07	-4,08
<b>bvsr_3_2</b>	<b>-18,00</b>	<b>-12,90</b>	<b>-12,90</b>	<b>-5,04</b>	<b>-5,04</b>	<b>-7,83</b>	<b>-5,10</b>	<b>0,08</b>	<b>0,08</b>	<b>-5,10</b>	<b>-0,02</b>	<b>-10,15</b>	<b>-7,80</b>	<b>-5,10</b>	<b>-5,10</b>
bvsr_4_1	-15,93	-11,88	-11,84	-4,06	-4,06	-7,79	-4,05	0,00	-0,03	-4,04	0,00	-8,13	-7,84	-4,05	-4,09
bvss_1_1	-16,15	-12,14	-12,14	-3,99	-3,99	-8,13	-4,01	0,03	0,03	-4,02	-0,02	-8,00	-8,12	-4,01	-4,01
bvss_1_2	-17,23	-12,09	-13,22	-3,98	-5,06	-8,09	-4,01	0,04	0,03	-5,08	-0,01	-9,13	-8,13	-5,14	-4,01
bvss_1_3	-16,55	-12,03	-12,55	-4,09	-4,33	-8,02	-4,01	-0,08	0,03	-4,37	0,00	-8,54	-8,17	-4,53	-4,01
bvss_1_4	-16,06	-12,08	-12,10	-4,05	-3,86	-8,08	-4,00	-0,08	0,03	-3,93	0,03	-8,02	-8,13	-3,99	-3,96
<b>bvss_2_2</b>	<b>-18,27</b>	<b>-13,17</b>	<b>-13,17</b>	<b>-5,02</b>	<b>-5,02</b>	<b>-8,04</b>	<b>-5,08</b>	<b>0,05</b>	<b>0,04</b>	<b>-5,08</b>	<b>0,02</b>	<b>-10,25</b>	<b>-8,10</b>	<b>-5,10</b>	<b>-5,10</b>
bvss_2_3	-17,59	-13,09	-12,49	-5,14	-4,29	-7,97	-5,08	-0,08	0,05	-4,36	0,02	-9,64	-8,15	-4,50	-5,10
bvss_2_4	-17,21	-13,13	-12,05	-5,23	-3,90	-8,01	-5,08	-0,11	0,05	-3,92	-0,03	-9,17	-8,20	-4,07	-5,16
bvss_3_3	-16,92	-12,41	-12,41	-4,43	-4,43	-7,89	-4,36	-0,07	-0,07	-4,36	0,01	-9,04	-8,19	-4,51	-4,51
bvss_3_4	-16,55	-12,46	-11,98	-4,53	-4,03	-7,94	-4,37	-0,12	-0,08	-3,92	-0,03	-8,58	-8,26	-4,09	-4,57
bvss_4_4	-16,23	-12,22	-12,22	-4,00	-4,00	-8,16	-3,88	-0,16	-0,16	-3,88	0,05	-8,12	-8,47	-4,02	-4,02

Fortsetzung Tabelle C71

Sub- struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
bvsr_1_1	-11,40	-8,93	-8,91	-0,14	-0,26	-6,44	-1,71	2,24	2,20	-1,75	3,15	0,66	0,71	1,58	1,58
bvsr_1_2	-12,39	-8,91	-9,92	-0,04	-1,29	-6,41	-1,71	2,32	2,21	-2,80	3,17	0,67	0,73	1,58	1,57
bvsr_1_3	-11,99	-9,52	-8,88	-0,84	0,04	-6,39	-2,35	2,27	2,40	-1,72	3,28	0,78	0,66	1,68	1,58
bvsr_1_4	-11,44	-8,93	-8,93	-0,23	-0,23	-6,44	-1,70	2,16	2,16	-1,70	3,14	0,67	0,67	1,58	1,58
bvsr_2_1	-11,98	-9,51	-8,87	-0,78	-0,01	-6,39	-2,36	2,35	2,45	-1,75	3,26	0,78	0,71	1,68	1,58
bvsr_2_2	-13,02	-9,49	-9,87	-0,73	-1,10	-6,36	-2,35	2,43	2,45	-2,81	3,22	0,78	0,72	1,68	1,57
bvsr_2_3	-12,44	-9,48	-9,29	-0,85	-0,45	-6,35	-2,35	2,30	2,41	-2,16	3,22	0,79	0,68	1,68	1,56
bvsr_3_1	-12,42	-8,92	-9,91	-0,17	-1,25	-6,40	-1,82	2,30	2,28	-2,81	3,15	0,65	0,73	1,58	1,57
<b>bvsr_3_2</b>	<b>-13,42</b>	<b>-9,89</b>	<b>-9,89</b>	<b>-1,18</b>	<b>-1,18</b>	<b>-6,38</b>	<b>-2,81</b>	<b>2,37</b>	<b>2,37</b>	<b>-2,81</b>	<b>3,12</b>	<b>0,72</b>	<b>0,72</b>	<b>1,57</b>	<b>1,57</b>
bvsr_4_1	-11,42	-8,95	-8,91	-0,25	-0,20	-6,44	-1,83	2,22	2,26	-1,75	3,15	0,65	0,71	1,58	1,58
bvss_1_1	-11,29	-8,86	-8,86	0,01	0,01	-6,42	-1,59	2,46	2,46	-1,58	3,13	0,86	0,86	1,57	1,57
bvss_1_2	-12,39	-8,83	-9,95	0,05	-1,09	-6,40	-1,56	2,50	2,42	-2,69	3,14	0,88	0,81	1,57	1,58
bvss_1_3	-11,79	-8,82	-9,36	-0,07	-0,46	-6,39	-1,55	2,37	2,34	-2,06	3,14	0,89	0,74	1,57	1,56
bvss_1_4	-11,28	-8,86	-8,89	-0,08	0,09	-6,44	-1,59	2,32	2,41	-1,55	3,17	0,84	0,81	1,57	1,57
<b>bvss_2_2</b>	<b>-13,45</b>	<b>-9,92</b>	<b>-9,92</b>	<b>-1,03</b>	<b>-1,03</b>	<b>-6,37</b>	<b>-2,67</b>	<b>2,46</b>	<b>2,46</b>	<b>-2,67</b>	<b>3,17</b>	<b>0,83</b>	<b>0,83</b>	<b>1,58</b>	<b>1,58</b>
bvss_2_3	-12,85	-9,92	-9,33	-1,16	-0,39	-6,37	-2,67	2,32	2,38	-2,04	3,16	0,84	0,76	1,58	1,56
bvss_2_4	-12,45	-9,95	-8,87	-1,30	0,07	-6,40	-2,73	2,24	2,45	-1,53	3,12	0,78	0,83	1,58	1,57
bvss_3_3	-12,27	-9,32	-9,32	-0,54	-0,54	-6,36	-2,04	2,25	2,25	-2,04	3,13	0,76	0,77	1,56	1,56
bvss_3_4	-11,87	-9,35	-8,86	-0,68	-0,06	-6,39	-2,09	2,16	2,32	-1,51	3,10	0,71	0,84	1,56	1,57
bvss_4_4	-11,35	-8,90	-8,90	0,01	0,01	-6,41	-1,44	2,28	2,28	-1,44	3,19	0,88	0,88	1,57	1,57

Abbildung C72 :

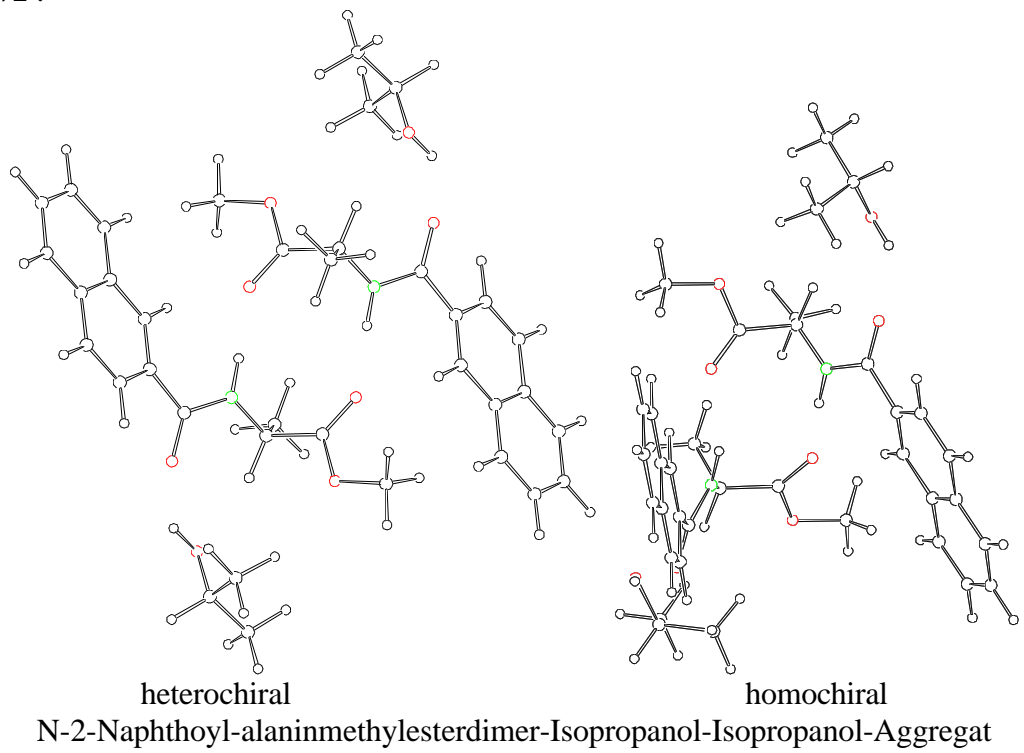


Tabelle C72 : Energien des N-2-Naphthoyl-alaninmethylesterdimer-Isopropanol-Isopropanol-Aggregates

	H / (kcal/mol)														
Sub- struktur	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
cnsr_1_1	-314,89	-242,95	-242,89	-220,85	-220,91	-170,95	-152,88	-148,96	-148,97	-152,86	-135,94	-80,99	-80,93	-67,97	-67,97
cnsr_1_2	-315,43	-242,93	-243,45	-220,71	-221,47	-170,93	-152,83	-148,83	-148,99	-153,44	-135,92	-80,94	-80,94	-67,98	-67,97
cnsr_1_3	-314,79	-242,80	-242,92	-220,64	-220,86	-170,92	-152,60	-148,95	-148,97	-152,83	-135,90	-80,90	-80,94	-67,97	-67,95
cnsr_1_4	-314,96	-242,95	-242,95	-220,93	-220,93	-170,94	-152,86	-149,02	-149,02	-152,86	-135,94	-80,97	-80,97	-67,97	-67,97
cnsr_2_1	-314,73	-242,80	-242,86	-220,57	-220,86	-170,92	-152,62	-148,88	-148,93	-152,83	-135,91	-80,91	-80,90	-67,97	-67,94
cnsr_2_2	-315,32	-242,78	-243,41	-220,49	-221,45	-170,89	-152,57	-148,77	-148,93	-153,40	-135,93	-80,87	-80,90	-67,98	-67,95
cnsr_2_3	-314,66	-242,76	-242,74	-220,72	-220,57	-170,87	-152,58	-149,00	-148,90	-152,51	-135,93	-80,89	-80,86	-67,97	-67,95
cnsr_3_1	-315,40	-243,45	-242,87	-221,42	-220,73	-170,93	-153,45	-148,91	-148,79	-152,83	-135,95	-80,95	-80,89	-67,97	-67,97
<b>cnsr_3_2</b>	<b>-315,98</b>	<b>-243,43</b>	<b>-243,43</b>	<b>-221,32</b>	<b>-221,32</b>	<b>-170,91</b>	<b>-153,40</b>	<b>-148,80</b>	<b>-148,80</b>	<b>-153,40</b>	<b>-135,97</b>	<b>-80,90</b>	<b>-80,90</b>	<b>-67,98</b>	<b>-67,98</b>
cnsr_4_1	-314,83	-242,90	-242,90	-220,84	-220,84	-170,96	-152,88	-148,91	-148,91	-152,88	-135,95	-80,94	-80,94	-67,97	-67,97
cnss_1_1	-315,40	-243,51	-243,51	-221,19	-221,20	-171,61	-153,26	-149,28	-149,28	-153,26	-135,94	-81,34	-81,34	-67,97	-67,97
cnss_1_2	-316,03	-243,48	-244,12	-221,18	-221,72	-171,57	-153,24	-149,25	-149,26	-153,77	-135,93	-81,32	-81,32	-67,95	-67,97
cnss_1_3	-315,29	-243,47	-243,39	-221,36	-220,89	-171,57	-153,23	-149,45	-149,34	-152,95	-135,93	-81,32	-81,40	-67,97	-67,97
cnss_1_4	-315,38	-243,51	-243,49	-221,23	-221,18	-171,60	-153,24	-149,33	-149,35	-153,25	-135,93	-81,33	-81,41	-67,97	-67,97
<b>cnss_2_2</b>	<b>-316,62</b>	<b>-244,09</b>	<b>-244,09</b>	<b>-221,66</b>	<b>-221,66</b>	<b>-171,54</b>	<b>-153,75</b>	<b>-149,23</b>	<b>-149,23</b>	<b>-153,75</b>	<b>-135,88</b>	<b>-81,30</b>	<b>-81,30</b>	<b>-67,95</b>	<b>-67,95</b>
cnss_2_3	-315,89	-244,09	-243,36	-221,86	-220,84	-171,54	-153,75	-149,43	-149,32	-152,93	-135,90	-81,30	-81,39	-67,97	-67,95
cnss_2_4	-316,03	-244,12	-243,46	-221,77	-221,18	-171,58	-153,75	-149,30	-149,32	-153,23	-135,94	-81,31	-81,38	-67,97	-67,95
cnss_3_3	-315,18	-243,35	-243,35	-221,06	-221,06	-171,53	-152,93	-149,51	-149,51	-152,93	-135,95	-81,38	-81,38	-67,97	-67,97
cnss_3_4	-315,30	-243,39	-243,46	-220,96	-221,36	-171,57	-152,93	-149,39	-149,50	-153,22	-135,96	-81,38	-81,38	-67,97	-67,97
cnss_4_4	-315,36	-243,49	-243,49	-221,22	-221,22	-171,60	-153,23	-149,39	-149,39	-153,23	-135,93	-81,39	-81,39	-67,97	-67,97

Fortsetzung Tabelle C72

Sub- struktur	$W_A$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AL1 AS2 AL2	AS1 AS2 AL1 AL2	AS1 AS2 AL2 AL1
cnr_1_1	-17,03	-13,07	-13,00	-3,92	-4,04	-9,04	-3,93	0,01	-0,08	-3,96	0,00	-7,99	-9,14	-3,96	-4,03
cnr_1_2	-17,61	-13,09	-13,60	-3,83	-4,59	-9,05	-3,93	0,08	-0,08	-4,53	0,02	-8,58	-9,16	-4,53	-4,02
cnr_1_3	-17,03	-13,01	-13,11	-3,83	-4,00	-9,07	-3,76	-0,09	-0,08	-3,92	0,01	-7,97	-9,36	-4,02	-3,93
cnr_1_4	-17,09	-13,04	-13,04	-4,02	-4,03	-9,00	-3,93	-0,08	-0,08	-3,93	-0,01	-8,07	-9,23	-4,05	-4,05
cnr_2_1	-17,01	-13,05	-13,08	-3,74	-4,05	-9,11	-3,76	0,00	-0,09	-3,96	0,01	-7,91	-9,29	-3,96	-3,93
cnr_2_2	-17,63	-13,07	-13,67	-3,70	-4,63	-9,13	-3,76	0,08	-0,08	-4,52	-0,01	-8,50	-9,35	-4,57	-3,96
cnr_2_3	-16,99	-13,06	-13,02	-3,91	-3,79	-9,12	-3,75	-0,14	-0,09	-3,67	-0,02	-7,85	-9,56	-3,93	-3,97
cnr_3_1	-17,61	-13,64	-13,06	-4,53	-3,89	-9,09	-4,53	0,00	0,08	-3,96	0,00	-8,51	-9,12	-3,97	-4,55
<b>cnr_3_2</b>	<b>-18,22</b>	<b>-13,65</b>	<b>-13,65</b>	<b>-4,47</b>	<b>-4,47</b>	<b>-9,11</b>	<b>-4,53</b>	<b>0,08</b>	<b>0,08</b>	<b>-4,53</b>	<b>-0,02</b>	<b>-9,09</b>	<b>-9,17</b>	<b>-4,57</b>	<b>-4,57</b>
cnr_4_1	-17,00	-13,04	-13,04	-3,95	-3,95	-9,07	-3,96	0,01	0,01	-3,96	0,00	-7,92	-9,07	-3,96	-3,96
cnss_1_1	-16,78	-12,85	-12,86	-3,92	-3,92	-8,92	-3,95	0,03	0,03	-3,95	0,00	-7,85	-8,89	-3,92	-3,92
cnss_1_2	-17,47	-12,87	-13,53	-3,94	-4,48	-8,93	-3,95	0,02	0,03	-4,50	-0,01	-8,53	-9,03	-4,61	-3,94
cnss_1_3	-16,64	-12,78	-12,70	-4,11	-3,55	-8,85	-3,95	-0,16	0,02	-3,58	0,00	-7,79	-9,11	-3,85	-3,93
cnss_1_4	-16,71	-12,81	-12,79	-3,96	-3,83	-8,87	-3,94	-0,03	0,02	-3,87	0,01	-7,85	-8,89	-3,90	-3,92
<b>cnss_2_2</b>	<b>-18,11</b>	<b>-13,54</b>	<b>-13,54</b>	<b>-4,45</b>	<b>-4,45</b>	<b>-8,94</b>	<b>-4,50</b>	<b>0,02</b>	<b>0,02</b>	<b>-4,50</b>	<b>0,02</b>	<b>-9,19</b>	<b>-9,11</b>	<b>-4,57</b>	<b>-4,57</b>
cnss_2_3	-17,28	-13,45	-12,70	-4,64	-3,53	-8,85	-4,50	-0,16	0,02	-3,57	0,02	-8,45	-9,21	-3,83	-4,58
cnss_2_4	-17,42	-13,48	-12,80	-4,54	-3,87	-8,89	-4,49	-0,03	0,02	-3,87	-0,01	-8,52	-9,05	-3,94	-4,62
cnss_3_3	-16,48	-12,63	-12,63	-3,74	-3,74	-8,78	-3,58	-0,16	-0,16	-3,58	0,00	-7,70	-9,33	-3,86	-3,86
cnss_3_4	-16,60	-12,66	-12,73	-3,63	-4,04	-8,81	-3,58	-0,03	-0,16	-3,87	-0,02	-7,78	-9,15	-3,94	-3,87
cnss_4_4	-16,64	-12,74	-12,75	-3,88	-3,88	-8,82	-3,87	-0,03	-0,03	-3,87	0,02	-7,84	-8,90	-3,90	-3,90

Fortsetzung Tabelle C72

Sub- struktur	$W_M$ / (kcal/mol)														
	Gesamt	AS1 AS2 AL1	AS1 AS2 AL2	AS1 AL1 AL2	AS2 AL1 AL2	AS1 AS2	AS1 AL1	AS1 AL2	AS2 AL1	AS2 AL2	AL1 AL2	AS1	AS2	AL1	AL2
cnr_1_1	-11,21	-8,81	-8,75	0,53	0,47	-6,35	-1,04	2,88	2,87	-1,02	3,14	1,31	1,37	1,57	1,57
cnr_1_2	-11,75	-8,79	-9,31	0,67	-0,09	-6,33	-0,99	3,01	2,85	-1,60	3,16	1,36	1,36	1,57	1,56
cnr_1_3	-11,11	-8,66	-8,78	0,74	0,52	-6,32	-0,76	2,89	2,87	-0,99	3,18	1,40	1,36	1,59	1,57
cnr_1_4	-11,28	-8,81	-8,81	0,45	0,45	-6,34	-1,02	2,82	2,82	-1,02	3,14	1,33	1,33	1,57	1,57
cnr_2_1	-11,05	-8,66	-8,72	0,81	0,52	-6,32	-0,78	2,96	2,91	-0,99	3,17	1,39	1,40	1,60	1,57
cnr_2_2	-11,64	-8,64	-9,27	0,89	-0,07	-6,29	-0,73	3,07	2,91	-1,56	3,15	1,43	1,40	1,59	1,56
cnr_2_3	-10,98	-8,62	-8,60	0,66	0,81	-6,27	-0,74	2,84	2,94	-0,67	3,15	1,41	1,44	1,59	1,57
cnr_3_1	-11,72	-9,31	-8,73	-0,04	0,65	-6,33	-1,61	2,93	3,05	-0,99	3,13	1,35	1,41	1,57	1,57
<b>cnr_3_2</b>	<b>-12,30</b>	<b>-9,29</b>	<b>-9,29</b>	<b>0,06</b>	<b>0,06</b>	<b>-6,31</b>	<b>-1,56</b>	<b>3,04</b>	<b>3,04</b>	<b>-1,56</b>	<b>3,11</b>	<b>1,40</b>	<b>1,40</b>	<b>1,56</b>	<b>1,56</b>
cnr_4_1	-11,15	-8,76	-8,76	0,54	0,54	-6,36	-1,04	2,93	2,93	-1,04	3,13	1,36	1,36	1,57	1,57
cnss_1_1	-11,72	-9,37	-9,37	0,19	0,18	-7,01	-1,42	2,56	2,56	-1,42	3,14	0,96	0,96	1,57	1,57
cnss_1_2	-12,35	-9,34	-9,98	0,20	-0,34	-6,97	-1,40	2,59	2,58	-1,93	3,15	0,98	0,98	1,57	1,59
cnss_1_3	-11,61	-9,33	-9,25	0,02	0,49	-6,97	-1,39	2,39	2,50	-1,11	3,15	0,98	0,90	1,57	1,57
cnss_1_4	-11,70	-9,37	-9,35	0,15	0,20	-7,00	-1,40	2,51	2,49	-1,41	3,15	0,97	0,89	1,57	1,57
<b>cnss_2_2</b>	<b>-12,94</b>	<b>-9,95</b>	<b>-9,95</b>	<b>-0,28</b>	<b>-0,28</b>	<b>-6,94</b>	<b>-1,91</b>	<b>2,61</b>	<b>2,61</b>	<b>-1,91</b>	<b>3,20</b>	<b>1,00</b>	<b>1,00</b>	<b>1,59</b>	<b>1,59</b>
cnss_2_3	-12,21	-9,95	-9,22	-0,48	0,54	-6,94	-1,91	2,41	2,52	-1,09	3,18	1,00	0,91	1,59	1,57
cnss_2_4	-12,35	-9,98	-9,32	-0,39	0,20	-6,98	-1,91	2,54	2,52	-1,39	3,14	0,99	0,92	1,59	1,57
cnss_3_3	-11,50	-9,21	-9,21	0,32	0,32	-6,93	-1,09	2,33	2,33	-1,09	3,13	0,92	0,92	1,57	1,57
cnss_3_4	-11,62	-9,25	-9,32	0,42	0,02	-6,97	-1,09	2,45	2,34	-1,38	3,12	0,92	0,92	1,57	1,57
cnss_4_4	-11,68	-9,35	-9,35	0,16	0,16	-7,00	-1,39	2,45	2,45	-1,39	3,15	0,91	0,91	1,57	1,57

## Literaturverzeichnis

- [1] H.G.Elias, *Makromoleküle*, Hüthig & Wepf Verlag Basel Heidelberg (1971).
- [2] a. J.Ide, *Sensor Technology*, (April 1996).  
b. J.Ide, T.Nakamoto, T.Moriizumi, *Sensors and Actuators* **A49**, 73 (1995).
- [3] a. L.H.Easson, E.Stedmann, *Biochem. J.* **27**, 1257 (1933).  
b. E.Thall, *J.Chem. Educ.* **73**, 481 (1996).  
c. G.Bejuhr, U.Holzgrabe, *DAZ* **23**, 27 (1994).
- [4] T.Heinzerling, Dissertation, Marburg (1992).
- [5] C.Coors, Dissertation, Marburg (1988).
- [6] K.C.Kundy, P.A.Crooks, *J. Chromatogr.* **281**, 17 (1983).
- [7] R.Charles, E.Gil-Av, *J. Chromatogr.* **298**, 516 (1984).
- [8] W.L.Tsai, K.Herrmann, E.Hug, B.Rhode, A.S.Dreiding, *Helv. Chim. Acta* **68**, 2238 (1985).
- [9] A.Dobashi, N.Saito, Y.Motoyama, S.Hara, *J. Am.Chem. Soc.* **108**, 307 (1986).
- [10] a. A.Dobashi, Y.Motoyama, K.Kinoshita, S.Hara, N.Fukasaku, *Anal. Chem.* **59**, 2209 (1987).  
b. A.Dobashi, Y.Dobashi, S.Hara, in S.Ahuja, *Chiral Separation by Chromatography*, ACS Symposium Series **471** Washington DC (1991).
- [11] M.Jung, V.Schurig, *J. Chromatogr.* **605**, 161 (1992).
- [12] E.Gil-Av, V.Schurig, *J. Chromatogr.* **666**, 519 (1994).
- [13] A.Kurganov, *Chromatographia* **43**, 17 (1996).
- [14] R.Matusch, C.Coors, *Angew. Chem.* **101**, 624 (1989).
- [15] R.M.Carman, K.D.Klika, *Aust. J. Chem.* **44**, 895 (1991).
- [16] J.Martens, R.Bhushan, *J. Liquid Chromatogr.* **15**, 1 (1992).
- [17] P.Diter, S.Taudien, O.Samuel, H.B.Kagan, *J.Org.Chem.* **59**, 370 (1994).
- [18] E.Loza, D.Lola, A.Kemme, J.Freimanis, *J. Chromatogr.* **708**, 231 (1995).
- [19] a. L.R.Snyder, *Prinziples of Adsorption Chromatography*, M.Dekker N.Y. (1968).  
b. V.Meyer, *Praxis der Hochleistungs-Flüssigchromatographie*, 7.Aufl., Diesterweg Salle, Sauerländer Frankfurt/M (1992).

- [20] C.E.Dalglish, *J. Chem. Soc.* **1952**, 3940 (1952).
- [21] M.J.S.Dewar, W.Thiel, *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 4899 (1977).
- [22] A.A.Voityuk, A.A.Bliznyuk, *Theor. Chim. Acta* **72**, 223 (1987).
- [23] M.J.S.Dewar, E.G.Zoebisch, E.F.Healy, J.J.P.Stewart, *J. Am. Chem. Soc.* **107**, 3902 (1985).
- [24] J.J.P.Stewart, *J. Comp. Chem.* **10**, 209 (1989).
- [25] J.A. Pople, D.L.Beveridge, *Approximate molecular orbital theory*, Mc Graw Hill New York 1970.
- [26] M.J.S.Dewar, W.Thiel, *Theor. Chim. Acta* **46**, 89 (1977).
- [27] M.Goeppert-Mayer, A.L.Sklar, *J. Chem. Phys.* **6**, 645 (1938).
- [28] R.S.Mulliken, *J. Chim Phys.* **46**, 497 (1949).
- [29] J.Del Bene, H.H.Jaffee, *J. Chem. Phys.* **48**, 1807 (1968).
- [30] K.Y.Burstein, A.N.Isaev, *Theor. Chim. Acta* **64**, 397 (1984).
- [31] a Macromodel V.3.0, Columbia Univ. New York (1990).  
b. Macromodel V.3.5, Columbia Univ. New York (1992).  
c. F.Mohamadi, N.G.J.Richards, W.C.Guida, R.Liskamp, M.Lipton, C.Caufield, G.Chang, T.Hendrickson, W.C.Still, *J. Comp. Chem.* **11**, 440 (1990).
- [32] N.L.Allinger, *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 8127 (1977).
- [33] N.L.Allinger, J.H.Lii, Y.H.Yuh, *J. Am. Chem. Soc.* **111**, 8551 (1989).
- [34] a. S.J.Weiner, P.A.Kollmann, D.A.Case, U.C.Singh, C.Ghio, G.Alagona, S.Profeta, P.Weiner, *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 765 (1984).  
b. S.J.Weiner, P.A.Kollmann, D.T.Nguyen, D.A.Case, *J. Comp. Chem.* **7**, 230 (1986).
- [35] W.Thiel, *Tetrahedron* **44**, 7398 (1988).
- [36] A.A.Bliznyuk, A.A.Voityuk, *Theochem* **164**, 343 (1988).
- [37] M.Khalli, R.J.Woods, D.F.Weaver, V.H.Smith, *J. Comp. Chem.* **12**, 584 (1991).
- [38] M.A.Rios, J.Rodriguez, *J. Comp. Chem.* **13**, 860 (1992).  
J.Rodriguez, *J. Comp. Chem.* **15**, 183 (1994).
- [39] M.J.Jurema, G.C.Shields, *J. Comp. Chem.* **14**, 89 (1993).
- [40] O.N.Ventura, E.L.Coitino, A.Lledos, J.Bertran, *Theochem* **187**, 55 (1989).
- [41] J.J.P.Stewart, *J. Comp. Aid. Mol. Design.* **4**, 1 (1990).
- [42] M.J.S. Dewar, W. Thiel, *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 4907 (1977).

- [43] J.J.P.Stewart, *J. Comp. Chem.* **10**, 221 (1989).
- [44] a. SYBYL V.5.4 Tripos Assoc. St. Louis (1991).  
b. M.Clark, R.D.CramerIII, N.van Opdenbosch, *J. Comp. Chem.* **10**, 982 (1989).
- [45] K.Gundertofte, J.Palm, I.Pettersson, A.Stamvik, *J. Comp. Chem.* **12**, 200 (1991).
- [46] I.Pettersson, T.Liljefors, *J. Comp. Chem.* **8**, 1139 (1987).
- [47] G.Karlström, P.Linse, A.Wallqvist, B.Jönsson, *J. Am. Chem. Soc.* **105**, 3777 (1983).
- [48] P.Hobza, J.Sponer, T.Reschel, *J. Comp. Chem.* **16**, 1315 (1995).
- [49] N.L.Allinger, J.H.Lii, *J. Comp. Chem.* **8**, 1146 (1987).
- [50] G.A.Jeffry, W.Saenger, *Hydrogen Bonding in Biological Structures*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991).
- [51] H.S.Rzepa, M.Yi, *J. Chem. Soc. Perkins Trans. II*, 943 (1990).
- [52] E.J.Del Bene, *J. Chem. Phys.* **62**, 1961 (1975).
- [53] A.M.Sapse, L.M.Fugler, D.Cowburn, *Int J. Quantum. Chem.* **29**, 1241 (1986).
- [54] J.B.O.Mitchell, S.L.Price, *J. Comp. Chem.* **11**, 1217 (1990).
- [55] Reiher, Thesis, Harvard University (1985).
- [56] A.J.Stone, *Theoretical Models of Chemical Bonding Part 4*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991) und dort zitierte Literatur.
- [57] U.Hanenberg, unpublizierte Ergebnisse
- [58] G.Waksman, D.Kominos, S.C.Robertson, N.Pant, D.Baltimore, R.B.Birge, D.Cowburn, H.Hanafusa, B.J.Mayer, M.Overduin, M.D.Resh, C.B.Rios, L.Silverman, J.Kuriyan, *Nature* **358**, 646 (1992).
- [59] D.A.Rodham, S.Suzuki, R.D.Suenram, F.J.Lovas, S.Dasgupta, W.A.Goddard, G.A.Blake, *Nature* **362**, 735 (1993).
- [60] S.Suzuki, P.G.Green, R.E.Bumgarner, S.Dasgupta, W.A.Goddard, G.A.Blake, *Science* **257**, 942 (1992).
- [61] a. K.Lipkowitz, J.M.Landwer, T.Darden, *Anal. Chem.* **58**, 1611 (1986).  
b. K.Lipkowitz, D.Demeter, C.Parish, T.Darden, *Anal.Chem.* **59**, 1731 (1987).  
c. K.Lipkowitz, D.Demeter, C.Parish, J.Landwer, T.Darden, *J. Comp. Chem.* **8**, 753 (1987).  
d. K.Lipkowitz, D.Demeter, J.Landwer, C.Parish, T.Darden, *J. Comp. Chem.* **9**, 63 (1988).  
e. K.Lipkowitz, B.Baker, R.Zegarra, *J. Comp. Chem.* **10**, 718 (1989).

- f. K.Lipkowitz, D.Demeter, R.Zegarra, R.Larter, T. Darden, *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 3446 (1988).
- g. B. Baker, K Lipkowitz, R. Zegarra, *J. Comp. Chem.* **10**, 718 (1989).
- [62] W. Pirkle, T. Pochapsky, *Chem. Rev.* **89**, 347 (1989).
- [63] G.Krüger, H.Berndt, J.Grötzinger, *J. Chromatogr.* **397**, 223 (1987).
- [64] U.Norinder, E.Sundholm, *J. Chromatogr.* **10**, 2825 (1987).
- [65] I.Alkorta, J.Elguero, P.Goya, C.Roussel, *Chromatographia* **27**, 77 (1989).
- [66] a. R.Boehm, D.Martire, D.Armstrong, *Anal. Chem.* **60**, 522 (1988).
- b. D.Armstrong, T.Ward, R.D.Armstrong, T.Beesiy, *Science* **232**, 1132 (1986).
- [67] R. Wolf, E.Francotte, D.Lohmann, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. II*, 893 (1988).
- [68] A.Topiol, M.Sabio, J.Moroz, W.Caldwell, *Chem. Soc.* **110**, 8367 (1988).
- [69] R.Däppen, H.R.Karfunkel, F.J.J.Leusen, *J. Comp. Chem.* **11**, 181 (1990).
- [70] J.Aerts, *J. Comp. Chem.* **16**, 914 (1995).
- [71] a. M.G.Still, L.B.Rogers, *Talanta* **36**, 36 (1989).
- b. M.G.Still, L.B.Rogers, *Talanta* **37**, 599 (1990).
- c. M.G.Still, L.B.Rogers, *J. Comp. Chem.* **11**, 242 (1990).
- [72] SIMUL : M.Jung, QCPE Program Exchange #620.
- [73] J.R.Rice, *Numerical Methods, Software and Analysis*, McGraw-Hill New York (1983).
- [74] B.P.Flannery, W.H.Press, S.A.Teukolsky, W.T.Vetterling, *Numerical Recipes The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press Cambridge (1986).
- [75] a. E.Hairer, S.P.Norsett, G.Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations I*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1987).
- b. E.Hairer, G.Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1991).
- [76] C.W.Gear, *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*, Prentice-Hall Englewood Cliffs N.Y (1971).
- [77] Bronstein, Semendjajew, *Taschenbuch der Mathematik*, Verlag Harri Deutsch Frankfurt/M (1980).
- [78] Francois Viète, *De emendatione*, (1615).
- [79] J.Stoer, *Einführung in die Numerische Mathematik I*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1983).



J.Stoer, *Einführung in die Numerische Mathematik II*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1978).

- [80] MOPAC 5.0: J.J.P:Stewart, QCPE Program Exchange #455.
- [81] MOPAC 6.0: J.J.P:Stewart, QCPE Program Exchange #455.
- [82] SCAMP : T.Clark, Universität-Erlangen.
- [83] VAMP 4.4: T.Clark, Universität-Erlangen.
- [84] C.Chipot, R.Jaffe, B.Maigret, D.Pearlman, P.A.Kollman, *J. Am. Chem. Soc.* **118**, 11217 (1996).
- [85] a. E.Keller, SCHAKAL-92, Fortran-Programm für die graphische Darstellung von Molekülen, Universität Freiburg, (1992).  
b. E.Keller, SCHAKAL-88, Fortran-Programm für die graphische Darstellung von Molekülen, Universität Freiburg, (1988).

## Lebenslauf

18.07.1958	geboren in Dortmund als erster Sohn der Eheleute Margit und Bruno Krüger
1965 -1969	Besuch verschiedener Volks- bzw. Grund- und Hauptschulen
1969	Nach dem 5.Hauptschuljahr Wechsel zum städt. Gymnasium Plettenberg
13.06.1978	Abitur am Leibniz Gymnasium in Pirmasens
19.02.1979	Anfang des Chemiestudiums an der Georg-August Universität Göttingen
15.10.1979	Wechsel zur Philipps-Universität Marburg
29.03.1982	Vordiplom Chemie
03.06.1985 -30.09.1986	Zivildienst als Rettungssanitäter beim Roten Kreuz Stadtallendorf
11.04.1988	Wiederaufnahme des Chemiestudiums an der Philipps-Universität Marburg
28.02.1989	Diplom Prüfung
01.03.1989 -21.05.1990	Diplomarbeit bei Herrn Prof. Dr. Schweig am Fachbereich Physikalische Chemie mit dem Thema: Versuche zur Verbesserung semiempirischer Valenzelektronenberechnungen von Elektronenanregungen.
01.06.1990	Anfang einer Promotionsarbeit bei Herrn Prof. Dr. Matusch im Institut für Pharmazeutische Chemie der Philipps Universität-Marburg
16.06.1990	Antritt einer wissenschaftlichen Hilfskraftstelle im Institut für Pharmazeutische Chemie der Philipps Universität-Marburg
17.06.1991 -16.06.1994	Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Institut für Pharmazeutische Chemie der Philipps Universität-Marburg (in verschiedenen Praktika tätig)